



Simulation d'images de dislocations en topographie aux rayons X en translation

Alain Soyer

► To cite this version:

Alain Soyer. Simulation d'images de dislocations en topographie aux rayons X en translation. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Pierre et Marie Curie (Paris 6), 1983. Français. NNT : . tel-01217796

HAL Id: tel-01217796

<https://hal.science/tel-01217796>

Submitted on 22 Oct 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE DE DOCTEUR-INGENIEUR

présentée
à l'Université Pierre et Marie CURIE
- Paris 6 -

par M. Alain SOYER

pour obtenir le titre de DOCTEUR-INGENIEUR

Sujet de la thèse:

Simulation d'images de dislocations en topographie aux rayons
X en translation.

soutenue le 20 décembre 1983

devant le jury composé de:

M. André AUTHIER	Président
M. Georges CHAMPIER	Examineur
M. Yves EPELBOIN	Examineur
M. Bernard LEROY	Examineur
M. Daniel TAUPIN	Examineur
M. Louis TAUZIET	Examineur

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire de Minéralogie Cristallographie de l'université Pierre et Marie CURIE (PARIS 6).

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur AUTHIER pour l'intérêt constant qu'il a porté à ce travail malgré ses nombreuses activités, et qui me fait l'honneur de présider mon jury de thèse.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur CHAMPIER qui a accepté de juger ce travail.

Monsieur EPELBOIN a dirigé l'ensemble de mes activités tout au long des deux années et demie que j'ai passées au laboratoire sous sa responsabilité. Il m'a initié à la théorie dynamique des rayons X et aux méthodes de simulation sur ordinateur. Les nombreuses discussions que nous avons eues, son dynamisme, ses conseils et ses encouragements ont seuls permis la réalisation de cette étude et de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de mon amitié et de ma gratitude.

Mais je dois aussi le remercier comme responsable du centre de calcul: depuis plusieurs années il se bat avec acharnement pour mettre à la disposition des chercheurs du laboratoire (donc en particulier à la mienne) les moyens informatiques les plus puissants et les plus modernes.

Je remercie également Messieurs LEROY et TAUPIN d'avoir bien voulu s'intéresser à mon travail et participer au jury de ma thèse.

Le programme de simulation d'images qui est le fruit de mes efforts a été développé grâce à l'utilisation d'un processeur vectoriel FPS100. Je suis donc reconnaissant à Monsieur TAUZIET d'avoir accepté d'être membre du jury.

Je tiens à remercier aussi toutes les personnes dont la collaboration m'a été précieuse, comme par exemple M. PETROFF et Mme MALGRANGE ainsi que M. ZARKA et Mme LEFELD SOSNOWSKA pour les topographies expérimentales, MM. MORRIS et GUIDI MCROSINI pour leur aide informatique, et plus particulièrement M. JEANNE MICHAUD pour les illustrations de ce rapport.

- SOMMAIRE -

INTRODUCTION

CHAPITRE 1

RAPPELS:

A./-Théorie dynamique de la diffraction des rayons X.

- 1.-Introduction
- 2.-Onde plane, cristal parfait
- 3.-Onde sphérique, cristal parfait
- 4.-Cristal déformé

E./-Montage expérimental pour les topographies en transmission.

C./-Contraste des images de dislocations.

- 1.-Introduction
- 2.-Image directe
- 3.-Image dynamique
- 4.-Image intermédiaire
- 5.-Cas des translations

CHAPITRE 2

SIMULATION D'IMAGES DE DISLOCATIONS:

A./-Simulation de sections.

- 1.-Introduction
- 2.-Intégration des équations de Takagi
- 3.-Principe du calcul de la déformation

B./-Simulation de translations.

- 1.-Rappels
- 2.-Programme à pas variables pour simulation de sections
- 3.-Test de la validité de l'algorithme numérique
- 4.-Théorème de réciprocité appliqué aux translations
- 5.-Problèmes rencontrés
- 6.-Cause probable de ces problèmes

C./-Conclusion.

CHAPITRE 3

LE PROGRAMME DE SIMULATION DE TRANSLATIONS:

A./-Généralités.

- 1.-Introduction
- 2.-Le processeur vectoriel FPS100
- 3.-Principes d'organisation

B./-Réalisation.

- 1.-Le programme INIT
- 2.-Calculs préparatoires
- 3.-Calcul d'une ligne d'image
- 4.-Système de sauvegardes

C./-Visualisation des images.

- 1.-Importance de la visualisation
- 2.-Différentes méthodes employées
- 3.-Visualisation sur Péricolor 2000

CHAPITRE 4

EXEMPLES D'APPLICATIONS:

A./-Dislocations dans le Silicium.

- 1.-Dislocation très inclinée
- 2.-Dislocation faiblement inclinée

B./-Autres exemples de simulations.

- 1.-Dislocations dans KDP avec $\vec{h} \cdot \vec{b} = 0$
- 2.-Dislocations dans Ga-As en rayonnement blanc

C./-Paquets de dislocations et canaux.

- 1.-Paquet de dislocations dans le Formiate de Lithium
- 2.-Canaux dans le Béryl
- 3.-Conclusion

D./-Simulations de sections.

- 1.-Programme DEFVAP
- 2.-Programme SLIT

CONCLUSION

BIBLIOGRAPHIE

- INTRODUCTION -

La topographie aux rayons X en transmission est une des techniques employée pour l'étude et la caractérisation des défauts présents dans les matériaux, tels que fautes d'empilements, dislocations, parois de domaines ...etc.

La méthode expérimentale la plus utilisée, la topographie en translation (Lang 1959), a l'avantage de fournir de manière non destructive une image de l'ensemble des défauts présents dans un grand volume de l'échantillon étudié.

La détermination des paramètres caractéristiques d'une dislocation, comme par exemple le vecteur de Burgers, à partir des images expérimentales n'est généralement pas aisée. Depuis de nombreuses années le laboratoire a développé des programmes de simulation sur ordinateur dans le cas des topographies en pose fixe (Balibar et Authier 1967, Epelboin 1974). Ces programmes basés sur l'intégration numérique des équations de Takagi (1962 et 69) permettent de calculer la propagation des ondes dans un cristal déformé et de simuler l'image théorique d'une dislocation.

L'intérêt que présente les simulations d'images de dislocations pour une meilleure compréhension des phénomènes intervenant lors de la formation des contrastes, ainsi que pour l'interprétation des topographies, est souligné par différents travaux. Citons par exemple l'étude d'Epelboin (1975) qui a montré, en visualisant le trajet de l'énergie dans un plan d'incidence, que le contraste d'une dislocation ne pouvait être expliqué que par la présence simultanée de champs d'ondes courbés et recréés; ou bien la détermination des vecteurs de Burgers de dislocations dans le quartz (Epelboin et Patel 1982) par comparaison de sections simulées et expérimentales dans le cas où les règles d'extinction usuelles ne permettaient pas cette détermination.

De façon générale les simulations de sections se sont avérées précieuses tant sur le plan expérimental pour caractériser quantitativement les défauts que pour réaliser des expériences sur ordinateur, impossibles à effectuer dans la réalité, qui ont permis de vérifier ou comprendre différents points théoriques.

Notre thèse se situe dans la suite logique de ces travaux: il s'agissait de réaliser un programme de simulation d'images de dislocations en topographie en translation. Outre son intérêt théorique, ce programme était nécessaire dans le cas des cristaux minces pour lesquels les sections sont inutilisables.

Dans le premier chapitre nous rappelons succinctement les bases de la théorie dynamique afin d'introduire les équations de Takagi utilisées dans les programmes de calcul. Nous y décrivons aussi les contrastes des dislocations observées en topographie en transmission.

Les différentes méthodes envisageables pour simuler les translations ainsi que les problèmes qu'elles ont soulevés sont décrits au chapitre 2. Cette description est précédée d'un paragraphe sur les simulations de sections indispensable pour la compréhension des types et méthodes de calcul utilisés. Nous montrerons en particulier les difficultés que soulève l'application du principe de retour inverse de la lumière.

Le chapitre 3 présente une description sommaire du programme de simulation réalisé, ainsi que du matériel informatique et des techniques de programmation employés. La particularité des programmes est en effet d'utiliser les moyens les plus modernes mis à notre disposition, en particulier un processeur vectoriel et une console de visualisation et de traitement d'images.

Des exemples d'applications pour des dislocations de géométries diverses dans des cristaux de différentes natures sont donnés dans le dernier chapitre, ainsi que pour des paquets de dislocations et des canaux. Dans ces derniers cas nous avons étudié la formation des images directes à l'aide de critères introduits par Authier et Balibar.

- CHAPITRE 1 -

RAPPELS:

A./-Théorie dynamique de la diffraction des rayons X.

1.-Introduction

2.-Onde plane, cristal parfait

- a) Equation de propagation
- b) Cas à deux faisceaux
- c) Champs d'ondes, surface de dispersion
- d) Conditions aux limites
- e) Calcul des amplitudes
- f) Trajet de l'énergie

3.-Onde sphérique, cristal parfait

- a) Onde incidente réelle
- b) Conséquence
- c) Franges de Kato

4.-Cristal déformé

- a) Introduction
- b) Prise en compte de la déformation
- c) Equations de Takagi
- d) Critère de l'optique géométrique

E./-Montage expérimental pour les topographies en transmission.

C./-Contraste des images de dislocations.

1.-Introduction

2.-Image directe

3.-Image dynamique

4.-Image intermédiaire

5.-Cas des translations

A./-THEORIE DYNAMIQUE DE LA DIFFRACTION DES RAYONS X

1.-INTRODUCTION:

Introduite dès le début du siècle par Darwin (1914) et Ewald (1917), la théorie dynamique de la diffraction des rayons X n'a été réellement employée qu'à partir des années 1950-60.

C'est à cette époque en effet, avec l'apparition de cristaux de grande perfection, que s'est fait sentir la nécessité de tenir compte de l'interaction de l'onde électromagnétique incidente avec le milieu cristallin triplement périodique, interaction non prise en compte par la théorie classique dite cinématique.

Dans ce paragraphe A nous rappellerons succinctement les bases de la théorie dynamique. Ces rappels ont deux buts principaux:

- d'une part introduire les équations de Takagi qui permettent de calculer les amplitudes des ondes se propageant dans un cristal déformé, et à partir desquelles sont bâtis les programmes de simulation d'images de défauts;
- d'autre part aider à la compréhension de l'origine du contraste des images obtenues en topographie aux rayons X en transmission.

2.-ONDE PLANE, CRISTAL PARFAIT:

Dans ce paragraphe, nous considérons une onde plane d'extension latérale infinie, et de vecteur d'onde \vec{K}

$$\vec{D}^{(a)} = \vec{D}^{(a)} \exp 2\pi i (\nu t - \vec{K} \cdot \vec{r}) \quad (1)$$

incidente sur un cristal parfait.

a) Equation de propagation:

A partir des équations de Maxwell,

$$\text{rot } \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\text{div } \vec{D} = 0 \quad (4)$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \quad (5)$$

en tenant compte de:

$$\vec{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \vec{E} \quad (6)$$

et en négligeant χ^2 devant χ , on démontre que l'induction électrique \vec{D} dans le cristal doit vérifier l'équation de propagation:

$$\Delta \vec{D} + \text{rot rot } \chi \vec{D} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} \quad (7)$$

Ici apparaît une différence fondamentale par rapport à la théorie cinématique: on ne suppose plus la susceptibilité électrique χ constante et égale à celle du vide, mais on prend une fonction triplement périodique des variables d'espace que l'on développe en série de Fourier:

$$\chi = \sum_h \sum_k \sum_l \chi_{hkl} \exp - 2\pi i (\vec{h} \cdot \vec{r})$$

Pour simplifier on utilisera la notation usuelle qui consiste à noter simplement h à la place des trois indices h , k et l , et à écrire un seul signe somme, ce qui donne:

$$\chi = \sum_h \chi_h \exp - 2\pi i (\vec{h} \cdot \vec{r}) \quad (8)$$

b) Cas à deux faisceaux:

Les solutions possibles de l'équation de propagation (7) sont des ondes de Bloch :

$$\vec{D} = \exp 2\pi i \nu t \sum_h \vec{D}_h \exp - 2\pi i \vec{k}_h \cdot \vec{r} \quad (9)$$

où les vecteurs d'ondes dans le cristal \vec{k}_h sont reliés par:

$$\vec{k}_h = \vec{k}_0 + \vec{h} \quad (10)$$

\vec{h} étant un vecteur du réseau réciproque.

En reportant (8) et (9) dans l'équation (7), on obtient un système infini d'équations vectorielles linéaires que l'on ne sait pas résoudre dans le cas général. Cependant, pour les rayons X, seuls deux noeuds du réseau réciproque 0 et H se situent simultanément au voisinage de la sphère d'Ewald. Dans ce cas le système infini se limite, après décomposition de l'onde incidente non polarisée en deux ondes polarisées, à:

$$\begin{cases} \frac{k_h^2 - K^2}{k_h^2} D_h = \chi_0 D_h + \chi_h D_0 C \\ \frac{k_0^2 - K^2}{k_0^2} D_0 = \chi_0 D_0 + \chi_{\bar{h}} D_h C \end{cases} \quad (11)$$

avec $C=1$ ou $\cos 2\theta$ selon que l'onde incidente est polarisée perpendiculairement ou parallèlement au plan d'incidence respectivement.

c) Champs d'ondes, surface de dispersion:

Pour que le système (11) possède des solutions non triviales, il faut que son déterminant soit nul:

$$\left(\frac{k_o^2 - K^2}{k_o^2} - \chi_o \right) \cdot \left(\frac{k_h^2 - K^2}{k_h^2} - \chi_h \right) - \chi_h \chi_{\bar{h}} C^2 = 0 \quad (12)$$

Chaque solution de l'équation (12) est un couple de vecteurs d'ondes dans le cristal \vec{k}_o et \vec{k}_h . L'ensemble formé des deux ondes planes correspondant à un de ces couples est appelé champ d'ondes. Comme les vecteurs d'ondes \vec{k}_o et \vec{k}_h , issus des noeuds O et H du réseau réciproque, sont liés par la relation (10) ils ont une extrémité commune nommée point caractéristique. L'équation (12) peut alors être interprétée comme donnant le lieu des points caractéristiques P appelé surface de dispersion. L'intersection de cette surface avec le plan d'incidence est représentée sur la figure 1.

La région intéressante de la surface de dispersion correspondant au domaine de réflexion du cristal se situe au voisinage de l'intersection des deux sphères de centre O et H et de rayon:

$$k = \left(1 + \frac{\chi_o}{2} \right) K \quad (13)$$

Dans le plan d'incidence, si on approxime les deux cercles par leurs tangentes T_o et T_h , l'équation (12) devient:

$$\left[k_o - K \left(1 + \frac{\chi_o}{2} \right) \right] \cdot \left[k_h - K \left(1 + \frac{\chi_h}{2} \right) \right] = \frac{K^2}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \quad (14)$$

C'est l'équation d'une hyperbole représentée sur la figure 2. Les expressions entre crochets dans (14) correspondent géométriquement à P_oP et P_hP respectivement.

d) Conditions aux limites:

Sur la face d'entrée du cristal, on doit avoir continuité de la composante tangentielle du vecteur d'onde \vec{k} de l'onde incidente. L'extrémité M de ce vecteur est située sur le cercle de centre O et de rayon K que l'on approxime par sa tangente T_o' (voir figure 2). La position du point M est fixée par l'écart à l'incidence de Bragg:

$$\Delta\theta = (\vec{OL}_e, \vec{OM})$$

Traçons la normale à la face d'entrée du cristal dirigée vers l'intérieur et passant par le point M (Mz sur la figure 2). Cette

normale coupe la surface de dispersion en deux points P1 et P2. La condition de continuité de la composante tangentielle de \vec{K} impose donc pour les vecteurs d'ondes dans la direction incidente:

$$\vec{k}_{o1} = \vec{OP}_1, \quad \vec{k}_{o2} = \vec{OP}_2$$

En conséquence la relation (10) fixe:

$$\vec{k}_{h1} = \vec{HP}_1, \quad \vec{k}_{h2} = \vec{HP}_2$$

La deuxième condition aux limites consiste à dire que l'on doit avoir continuité de l'induction électrique (on suppose qu'il n'y a pas d'onde réfléchie en surface):

$$\begin{cases} \vec{D}^{(a)} = \vec{D}_{o1} + \vec{D}_{o2} \\ 0 = \vec{D}_{h1} + \vec{D}_{h2} \end{cases} \quad (15)$$

e) Calcul des amplitudes:

D'après le système (11), et avec les approximations déjà utilisées dans le paragraphe c), le rapport des amplitudes des ondes formant un champ d'ondes peut se mettre sous la forme:

$$R_j = \frac{D_{hj}}{D_{oj}} = \frac{k \chi_h C}{2 \overline{P_{hj} P}} = \frac{2 \overline{P_{oj} P}}{k \chi_h C} \quad (16)$$

avec $j=1$ ou 2 .

La combinaison des équations (15), projetées sur le plan d'incidence ou sa normale, et de (16) permet de calculer les amplitudes des ondes dans le cristal:

$$\begin{cases} D_{o1} = D^{(a)} R_2 / (R_2 - R_1) \\ D_{o2} = D^{(a)} R_1 / (R_1 - R_2) \\ D_{h1} = D^{(a)} R_1 R_2 / (R_2 - R_1) \\ D_{h2} = D^{(a)} R_1 R_2 / (R_1 - R_2) \end{cases} \quad (17)$$

Des expressions équivalentes, mais faisant intervenir le paramètre de déviation η et la longueur d'extinction Λ , sont

données dans l'annexe 1. Les quatre ondes arrivant en un point du cristal repéré par le vecteur \vec{r} peuvent donc se mettre sous la forme:

$$\begin{cases} D_{0j} = D_{0j} \exp - 2\pi i \left[\vec{k}_{0j} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_e) + \vec{K} \cdot \vec{r}_e \right] \\ D_{hj} = D_{hj} \exp - 2\pi i \left[\vec{k}_{hj} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_e) + (\vec{K} + \vec{h}) \cdot \vec{r}_e \right] \end{cases} \quad (18)$$

où \vec{r}_e est un vecteur repérant un point de la surface du cristal. Les figures 3 et 4 représentent les variations de ces amplitudes en fonction de l'écart à l'incidence de Bragg $\Delta\theta$.

f) Trajet de l'énergie:

La direction de propagation de l'énergie est donnée par le vecteur de Poynting défini par:

$$\vec{S}_j = \mathcal{R}(\vec{E}_j \wedge \vec{H}_j^*) \quad (19)$$

En calculant la moyenne de ce vecteur sur une maille, il est possible de montrer (Authier-1961) que:

$$\vec{S}_j = \frac{c}{\epsilon_0} \exp(4\pi \vec{k}_{0j} \cdot \vec{r}) \vec{s}_j \quad (20)$$

avec:

$$\vec{s}_j = |\vec{D}_{0j}|^2 \vec{s}_0 + |\vec{D}_{hj}|^2 \vec{s}_h \quad (21)$$

\vec{s}_0 et \vec{s}_h étant les vecteurs unitaires dans les directions réfractée et réfléchiée. L'angle α_j entre le vecteur de Poynting et les plans réflecteurs est donné par:

$$\tan \alpha_j = \frac{1 - |R_j|^2}{1 + |R_j|^2} \tan \theta_0 \quad (22)$$

Les figures 5 et 6 montrent la construction de \vec{s}_j et l'allure de variation du vecteur de Poynting. On remarquera que lorsque l'on s'éloigne de l'incidence de Bragg, on retrouve bien le résultat évident que seul le champ d'ondes se propageant dans la direction incidente reste significatif.

3.-ONDE SPHERIQUE, CRISTAL PARFAIT:

Jusqu'à présent, nous avons toujours supposé que l'onde

incidente était plane et d'extension latérale infinie, ce qui n'est évidemment pas le cas lors d'une expérience pratique. Le problème est donc de déterminer dans quel cas cette hypothèse peut être considérée comme valable.

a) Onde incidente réelle:

Kato (1961) a montré que l'onde incidente sur le cristal pouvait être considérée comme plane si elle satisfaisait à deux critères. D'abord:

$$f > s \quad (23)$$

où f est la largeur de faisceau dans laquelle la phase de l'onde incidente dans un plan peut être considérée comme constante: f est de l'ordre de grandeur du diamètre de la première zone de Fresnel de l'onde sphérique, c'est-à-dire $f \approx 2\sqrt{\lambda L}$, avec L distance de la source au cristal ($L \approx 30\text{cm}$). s , appelé taille effective du cristal par Kato, peut être approximé par le produit $L.\delta\theta$, où $\delta\theta$ est la largeur à mi-hauteur du profil de réflexion ($\delta\theta \approx 10^{-4}\text{rad}$). Ce critère est donc tout juste satisfait. Ensuite:

$$\delta\theta > \Omega_0 \quad (24)$$

où Ω_0 est de l'ordre de grandeur de la largeur angulaire du faisceau incident: $\Omega_0 \approx 10^{-4}$ pour les montages usuels utilisés en rayons X. Or $\delta\theta \approx 10^{-5}$ donc ce deuxième critère n'est pas vérifié, ce qui fait que l'onde incidente réelle ne peut être considérée comme plane.

b) Conséquence:

Kato a développé une théorie dynamique de la diffraction pour une onde incidente quelconque dont les principes de base sont résumés dans l'annexe 2. On peut considérer l'onde incidente sphérique comme la superposition d'ondes planes pour lesquelles la théorie dynamique "classique" s'applique. La conséquence essentielle est que l'on n'a plus seulement deux points caractéristiques de la surface de dispersion qui sont excités, mais toute cette surface. Le trajet de l'énergie se fait donc dans toute la région située entre \vec{s}_0 et \vec{s}_A (figure 7) appelée triangle de Borrmann.

c) Franges de Kato:

Kato a ainsi pu expliquer l'origine des franges qu'il avait observées avec Lang (1959). En effet, considérons les champs d'ondes issus des points P et \bar{P} symétriques par rapport au point de Lorentz L_0 (figure 8): ces champs se propagent dans la même direction, donc donnent naissance à des interférences. Kato a démontré que les minima d'intensité se situaient sur des cylindres hyperboliques (figure 7). L'intersection de ces cylindres avec la face de sortie donne soit des franges parallèles si le cristal est une lame à faces parallèles, soit des hyperboles si le cristal a la forme d'un coin.

4.-CRISTAL DEFORME:

a) Introduction:

Les topographies aux rayons X ont pour but d'étudier les défauts dans les cristaux; il est donc nécessaire, pour pouvoir interpréter les contrastes observés, que la théorie dynamique prenne en compte les déformations dues à ces défauts.

Une première théorie a été développée par Penning et Polder (1961) qui utilisèrent un découpage du cristal en fines lamelles, chacune de ces zones, caractérisée par sa propre valeur de χ_A et de \bar{h} , pouvant être considérée comme parfaite.

Une autre théorie due à Kato (1963 et 64) est basée sur l'emploi de fonctions de Bloch modifiées pour pouvoir tenir compte d'une onde incidente quelconque et de la déformation locale du cristal.

Néanmoins la validité de ces théories, qui sont basées sur des principes analogues à ceux de l'optique géométrique, est limitée au cas des cristaux présentant de faibles gradients de déformations.

Elles ne sont plus valables dans le cas des déformations à fort gradient, produites par exemple par une dislocation. (Ce point sera détaillé au paragraphe d).

Les théories développées par Takagi (1962 et 69) et par Taupin (1964) sont au contraire très générales et prennent en compte n'importe quel type de déformation. C'est celle de Takagi qui est utilisée dans les programmes de simulation.

b) Prise en compte de la déformation:

Un point du cristal parfait situé en \vec{r} se retrouve après déformation en $\vec{r} + \vec{u}(\vec{r})$ ce qui fait que le réseau n'est plus périodique; en conséquence les développements de $\chi(8)$ et de $\bar{D}(9)$ ne sont plus valables.

Cependant si l'on admet que les charges se déplacent avec les atomes pendant la déformation, on peut écrire la susceptibilité χ' du cristal déformé sous la forme:

$$\chi'(\vec{\pi}) = \chi[\vec{\pi} - \vec{u}(\vec{r})] \quad (25)$$

Ceci donne d'après (8):

$$\chi'(\vec{\pi}) = \sum_A \chi_A \exp - 2\pi i [\vec{h} \cdot \vec{\pi} - \vec{h} \cdot \vec{u}(\vec{r})] \quad (26)$$

D'autre part, la théorie de Takagi ne fait pas apparaître explicitement les deux champs d'ondes se propageant dans le cristal. Takagi utilise une pseudo onde de Bloch en prenant pour les coefficients du développement en série de Fourier des fonctions lentement variables de r au lieu des constantes habituelles. Dans ce cas, toute variation lente dans l'amplitude ou la phase peut être exprimée dans les fonctions $\mathcal{D}_A'(r)$, ce qui permet d'utiliser pour les champs d'ondes une seule somme:

$$\vec{D} = \exp 2\pi i v t \sum_h \vec{D}'_h(n) \exp -2\pi i (\vec{k}_h \cdot \vec{r} - \vec{h} \cdot \vec{u}(n)) \quad (27)$$

On peut définir un réseau réciproque local par:

$$\vec{h}' = \vec{h} - \text{grad} [\vec{h} \cdot \vec{u}(n)] \quad (28)$$

De même le nouveau vecteur d'onde du terme d'ordre h du développement peut s'écrire:

$$\vec{k}'_h = \vec{k}_h - \text{grad} [\vec{h} \cdot \vec{u}(n)] \quad (29)$$

c) Equations de Takagi:

Comme précédemment, dans le cas du cristal parfait, on reporte les équations (26) et (27) dans l'équation de propagation (7) et en négligeant tous les termes d'ordre supérieur à un, et en se limitant au cas où seuls deux noeuds du réseau réciproque sont proches de la sphère d'Ewald, on obtient un système de deux équations:

$$\begin{cases} \frac{\partial D'_0}{\partial s_0} = -i\pi K C \chi_{\vec{h}} D'_h \\ \frac{\partial D'_h}{\partial s_h} = -i\pi K C \chi_{\vec{h}} D'_0 + 2\pi i K \beta'_h D'_h \end{cases} \quad (30)$$

avec:

$$\beta'_h = \beta_h - \frac{1}{K} \frac{\partial [\vec{h} \cdot \vec{u}(n)]}{\partial s_h} = \frac{k_h - k_0}{K} - \frac{1}{K} \frac{\partial [\vec{h} \cdot \vec{u}(n)]}{\partial s_h} \quad (31)$$

β_h est un paramètre caractérisant l'écart à l'incidence de Bragg dans le cristal parfait, et le deuxième terme de β'_h représente la désorientation locale due à la déformation. β'_h est donc proportionnel à l'écart local à l'incidence de Bragg.

Dans le deuxième chapitre nous montrerons comment on peut résoudre ce système par une méthode numérique due à Authier, Malgrange et Tournarie (1968).

d) Critère de l'optique géométrique:

En dérivant la deuxième équation du système (30) par rapport à s_0 et en remplaçant $\partial D'_h / \partial s_0$ par sa valeur (première équation) on obtient l'équation aux dérivées partielles du second ordre à coefficients variables:

$$\frac{\partial^2 D'_h}{\partial s_0 \partial s_h} - 2\pi i K \beta'_h \frac{\partial D'_h}{\partial s_0} + \left[\pi^2 K^2 C^2 \chi_{\vec{h}} \chi_{\vec{h}} - 2\pi i K \frac{\partial \beta'_h}{\partial s_0} \right] D'_h = 0 \quad (32)$$

A partir de (32) Balibar (1969) a montré que l'on devait considérer deux types de défauts:

-Les défauts à faible gradient de déformation pour lesquels le coefficient de D'_k peut être considéré comme constant, c'est-à-dire qui sont tels que:

$$\left| \frac{\partial \beta'_k}{\partial \lambda_0} \right| \ll \frac{\pi}{2} K C^2 \chi_k \chi_{\bar{k}} \quad (33)$$

qui peut aussi s'écrire:

$$\left| \frac{\partial^2 (\vec{h} \cdot \vec{u}(s))}{\partial \lambda_0 \partial \lambda_k} \right| \ll \frac{\pi}{2} K^2 C^2 \chi_k \chi_{\bar{k}} = \frac{\pi \gamma \cdot \gamma_k}{2 \Lambda_0^2} \quad (34)$$

Dans ce cas les principes de l'optique géométrique peuvent s'appliquer et l'effet des déformations est de modifier de façon continue le trajet des champs d'ondes sans que ces derniers se décomposent: le point caractéristique d'un champ se déplace mais reste sur la même branche de la surface de dispersion.

-Les défauts à fort gradient de déformation, tels que les dislocations, pour lesquels le critère (34) n'est pas vérifié. Il se produit alors un phénomène de diffraction au sens de l'optique, qui s'accompagne d'une décomposition des champs d'ondes: un champ dont le point caractéristique est situé sur une des branches de l'hyperbole de la surface de dispersion va donner naissance lors de la traversée de la zone de "mauvais cristal" à deux champs d'ondes dont les points caractéristiques se situent sur des branches différentes de la surface de dispersion.

Nous verrons plus bas que ce phénomène de recreation de champs d'ondes permet d'expliquer l'origine du contraste des images de dislocation.

B./-MONTAGE EXPERIMENTAL POUR LES TOPOGRAPHIES EN TRANSMISSION

Parmi les méthodes d'investigation des imperfections cristallines, nous nous sommes intéressés à la topographie aux rayons X en transmission. Celle-ci permet d'étudier de façon non destructive des cristaux pouvant atteindre plusieurs millimètres d'épaisseur dans les cas peu absorbants.

C'est Lang (1959) qui a mis au point la méthode des translations, et observé grâce à elle des dislocations dans un cristal de Silicium.

Le montage de Lang comporte un faisceau issu du foyer d'un tube de rayons X et limité par une fente fine (figure 9). Le cristal à étudier est monté sur une tête goniométrique et réglé en position de Bragg pour la famille de plans réticulaires sélectionnée (Pr), et

pour la raie caractéristique choisie (généralement $K\alpha_1$). Le faisceau incident tombe sur la face d'entrée du cristal en A et, pour les raisons rappelées précédemment (A./-3), doit être considéré comme une onde sphérique. Les champs d'ondes dans le cristal se propagent donc dans tout le triangle de Borrmann ABC. A la sortie du cristal, le faisceau réfléchi (R) est recueilli sur une plaque photographique, une deuxième fente l'isolant du faisceau transmis (T).

Si l'ensemble du montage tel que nous venons de le décrire reste immobile, l'expérience est nommée section ou topographie en pose fixe.

Dans le cas qui nous intéresse, c'est-à-dire les translations, le cristal et la plaque photographique se déplacent solidairement dans un mouvement de va et vient, de manière à ce que le faisceau incident balaye entièrement le cristal. Comme le souligne Lang, l'avantage de cette méthode par rapport à une section réside dans le fait qu'en une seule expérience on obtient une image de l'ensemble des défauts présents dans le cristal. Notons qu'en plus de leur plus grande facilité de réglage, les translations peuvent se révéler seules possibles dans le cas de cristaux très minces, et avec un angle de Bragg petit: la base BC du triangle de Borrmann est alors tellement petite que l'image obtenue sur la plaque photographique lors d'une section est trop étroite pour qu'on puisse en tirer quoi que se soit.

C./-CONTRASTE DES IMAGES DE DISLOCATIONS

1.-INTRODUCTION:

Dans ce paragraphe nous décrirons la formation des images de dislocations lors d'une topographie aux rayons X en transmission. Nous nous placerons dans le cas où le produit du coefficient d'absorption linéaire μ par l'épaisseur du cristal t a une valeur moyenne ($\mu t < 4$). Nous nous intéresserons tout d'abord aux images obtenues en topographie en pose fixe.

Une étude détaillée du contraste des dislocations a été réalisée par Authier (1967) et a montré qu'il fallait distinguer trois parties différentes dans les images de dislocations:

- l'image directe
- l'image dynamique
- l'image intermédiaire

Nous avons volontairement choisi d'illustrer notre propos à l'aide de la topographie en pose fixe (figure 10) réalisée par Authier sur un cristal de silicium de 800 microns d'épaisseur, pour la réflexion $\bar{2}\bar{2}0$ avec le rayonnement $MoK\alpha$. Le vecteur de Burgers

de cette dislocation est $[1/2, 0, -1/2]$

2.-IMAGE DIRECTE:

La largeur du profil de réflexion d'un cristal parfait est donnée par:

$$\delta\theta = \frac{2|c|}{\sin 2\theta} \sqrt{\gamma_k \chi_k \chi_{\bar{k}} / \gamma_0} \quad (35)$$

avec:

$$\gamma_0 = \cos \Psi_0, \quad \gamma_k = \cos \Psi_k$$

Ψ_0 et Ψ_k étant les angles entre la normale \bar{n} à la face d'entrée du cristal et les directions réfractée \bar{s}_0 et réfléchie \bar{s}_k respectivement.

Seule une partie du faisceau incident est suffisamment proche de l'angle de Bragg pour se trouver dans la zone de réflexion du cristal, et donner naissance à des champs d'ondes. Le reste du faisceau, dit faisceau direct, se propage suivant AB (figure 11) subissant uniquement l'atténuation normale. Supposons qu'une dislocation coupe le faisceau direct en P: les déformations $\vec{u}(r)$ dues à la présence de cette dislocation se traduisent en particulier par une désorientation locale des plans réflecteurs qui peut s'écrire:

$$\delta(\Delta\theta) = \frac{-1}{k \sin 2\theta} \frac{\partial(\vec{h} \cdot \vec{u}(r))}{\partial s_k} \quad (36)$$

La région proche du coeur de la dislocation dans laquelle cette désorientation est supérieure à la largeur du profil de réflexion va donc diffracter le faisceau direct et donner un faisceau se propageant dans la direction réfléchie (faisceau 1 sur la figure 11). On observera sur la plaque photographique une tache noire appelée image directe de la dislocation (en bas à droite sur la figure 10).

D'après (35) et (36) la région donnant naissance à l'image directe peut être caractérisée par:

$$\left| \frac{\partial(\vec{h} \cdot \vec{u}(r))}{\partial s_k} \right| > \frac{2|c|}{\lambda} \sqrt{\frac{\gamma_k \chi_k \chi_{\bar{k}}}{\gamma_0}} \quad (37)$$

Nous désignerons ce critère de formation de l'image directe, qui a été introduit par Authier, sous le nom de critère de la dérivée première.

3.-IMAGE DYNAMIQUE:

L'image dynamique d'une dislocation se présente sur la plaque

photographique sous la forme d'une région blanche, souvent une ligne ou un croissant (figure 10). Elle garde la même allure lorsque l'on change le vecteur de réflexion h en son opposé, c'est-à-dire si l'on effectue une stéréo.

Cette image dynamique (point 3 sur la figure 11) est en quelque sorte "l'ombre chinoise" de la ligne de la dislocation qui intercepte les trajets de champs d'ondes tels que AQ. C'est pourquoi elle est plus large lorsque la dislocation est au centre du triangle de Borrmann et proche de la face d'entrée du cristal.

L'influence de la ligne de la dislocation peut aussi être assimilée à celle d'un écran linéaire (fil) donnant naissance à un phénomène de diffraction de Fraunhofer, ce qui explique pourquoi le croissant blanc formant la zone principale de l'image dynamique est bordé de franges plus ou moins visibles suivant la géométrie du défaut et l'absorption du cristal.

L'origine de l'image dynamique doit être attribuée à deux phénomènes différents:

- d'une part à la courbure des champs d'ondes qui traversent la région peu déformée, c'est-à-dire la région du cristal dans laquelle le critère (34) est vérifié.
- d'autre part à la création de nouveaux champs d'ondes qui "pompe" de l'intensité aux champs d'ondes incidents et se propagent dans une direction différente. En effet, dans la région déformée proche du cœur de la dislocation (point Q sur la figure 11), le critère de l'optique géométrique (34) n'est plus satisfait et il y a diffraction. Un champ d'ondes incident selon AQ va donner naissance à un autre champ se propageant dans la direction QM.

4.-IMAGE INTERMEDIAIRE:

Considérons le point M de la face de sortie du cristal (figure 11). En ce point vont arriver les champs d'ondes se propageant normalement selon AM; mais des champs qui ont été courbés lors de la traversée des régions peu déformées ainsi que ceux recréés au niveau du cœur Q de la dislocation et se propageant selon QM vont interférer avec les champs normaux. Ces interférences se traduiront sur la plaque photographique par une série de franges alternées noires-blanches appelée image intermédiaire (figure 10).

Comme la perturbation due au défaut se fait sentir dans un triangle ayant pour sommet le cœur de la dislocation, et d'angle au sommet égal à 2θ , on voit que pour une dislocation proche de la face d'entrée du cristal, pour laquelle presque toute la surface de dispersion est excitée, on aura une image intermédiaire très grande occupant presque toute la largeur de la section dans le plan d'incidence considéré (avec risque de recouvrement avec l'image dynamique).

Au contraire, si la dislocation est proche de la face de sortie, l'image intermédiaire sera petite mais séparée de l'image dynamique (sauf dans le cas particulier où le cœur de la dislocation se trouve sur la bissectrice de BAC).

Ajoutons de plus que l'image intermédiaire sera d'autant plus

visible que le coeur de la dislocation sera proche du côté du faisceau incident (c'est-à-dire de P) car l'interaction de la zone déformée avec les champs d'ondes est alors plus forte.

5.-CAS DES TRANSLATIONS:

Une topographie en translation peut être considérée comme une somme de topographies en pose fixe. L'image obtenue est une intégration de sections. Au cours de la translation, la divergence angulaire des faisceaux atteignant un point donné du défaut est très grande, et pour chaque position du cristal tous les phénomènes décrits antérieurement ont lieu. On conçoit donc que le contraste obtenu soit plus difficile à interpréter que dans le cas d'une section. L'image obtenue dépend énormément de la géométrie du défaut.

Cependant, comme le montre la topographie en translation de la figure 12 réalisée par Authier sur le même cristal que précédemment, on peut généralement conserver les notions d'images directe, dynamique et intermédiaire.

Dans le cas d'une topographie en pose fixe, l'image directe n'existe que si la dislocation coupe le faisceau direct, et elle se limite à une tache noire sur la photographie. Lors d'une translation le faisceau direct atteint successivement tous les points de la ligne de la dislocation; l'image directe intégrée se présentera donc sous la forme d'une ligne noire qui n'est autre que la projection de la ligne de la dislocation suivant la direction réfléchie.

Dans un plan d'incidence donné, l'image dynamique intégrée sera la somme de toutes les images dynamiques qui se répartissent dans le triangle ayant pour sommet le coeur de la dislocation et d'angle au sommet 2θ . De plus on aura souvent des recouvrements entre images dynamiques et intermédiaires, ce qui explique pourquoi l'image dynamique intégrée est plus "floue" que sur une section.

L'image intermédiaire intégrée sera elle aussi formée d'une somme d'images intermédiaires avec recouvrement fréquent avec les images dynamiques. Dans les cas particuliers où la dislocation est quasi parallèle ou perpendiculaire aux faces du cristal cette image sera invisible.

- CHAPITRE 2 -

SIMULATION D'IMAGES DE DISLOCATIONS:

A./-Simulation de sections.

- 1.-Introduction
- 2.-Intégration des équations de Takagi
- 3.-Principe du calcul de la déformation

E./-Simulation de translations.

- 1.-Rappels
- 2.-Programme à pas variables pour simulation de sections
- 3.-Test de la validité de l'algorithme numérique
- 4.-Théorème de réciprocité appliqué aux translations
- 5.-Problèmes rencontrés
- 6.-Cause probable de ces problèmes

C./-Conclusion.

A.-SIMULATION DE SECTIONS

1.-INTRODUCTION:

Historiquement, la première simulation d'image de dislocation a été réalisée par Balibar et Authier (1967). Le mot simulation désigne ici le calcul à l'aide d'un ordinateur de la propagation des rayons X dans un cristal contenant un défaut; cette simulation permet d'obtenir la répartition de l'intensité théorique réfléchie qui impressionne la plaque photographique dans une topographie. Les valeurs numériques de ces intensités calculées sont ensuite converties en densités de gris et représentées sous la forme d'une image qui pourra être comparée à la topographie expérimentale.

Dans le paragraphe 2 nous décrivons la méthode utilisée dans les programmes de simulation pour intégrer les équations de Takagi. Cette méthode est tout à fait générale et ne nécessite aucune hypothèse quant à la nature du défaut considéré. Dans le paragraphe suivant par contre nous rappelons le principe du calcul de la déformation en nous limitant au cas des dislocations linéaires.

2.-INTEGRATION DES EQUATIONS DE TAKAGI:

Les amplitudes des ondes se propageant dans le triangle de Borrmann sont calculées à l'aide des équations de Takagi (30). Ces équations sont des équations aux dérivées partielles de type hyperbolique à coefficients variables, et doivent être intégrées numériquement.

Authier, Malgrange et Tournarie (1968) ont envisagé diverses méthodes pour résoudre le système (30): celle retenue comme étant la meilleure, dite méthode de la dérivée au demi-pas, permet de mettre les équations de Takagi sous la forme (voir annexe 3):

$$\begin{bmatrix} D'_0(s_0, s_h) \\ D'_h(s_0, s_h) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} C_2 & A.C_2 & A.B & A.C_1 \\ B & A.B & B & C_1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} D'_0(s_0-p, s_h) \\ D'_h(s_0-p, s_h) \\ D'_0(s_0, s_h-q) \\ D'_h(s_0, s_h-q) \end{bmatrix} \quad (38)$$

avec:

$$A = -i \frac{\pi}{2} K \chi_h p$$

$$B = -i \frac{\pi}{2} K \chi_h q$$

$$C_1 = 1 + W$$

$$C_2 = 1 - W$$

$$E = \frac{1}{1 - W - A.B}$$

$$W = i\pi K q \beta'_k \left(s_0, s_k - \frac{q}{2} \right)$$

où p et q sont les pas de calcul suivant \vec{s}_0 et \vec{s}_k . Le point où l'on calcule les amplitudes est repéré ici par ses coordonnées s_0 et s_k dans le repère oblique du triangle de Borrmann.

Dans une étude plus récente Nourtier et Taupin (1981) ont comparé la méthode de la dérivée au demi-pas avec une méthode numérique plus sophistiquée de type Runge-Kutta. Ils sont arrivés à la conclusion que pour une précision de calcul donnée, la première méthode était la plus rapide. Comme elle est aussi plus simple à programmer, on l'utilise toujours dans les programmes de simulation.

Si l'on découpe par la pensée le triangle de Borrmann par une série de droites parallèles aux faisceaux réfracté et réfléchi, les intersections de ces droites forment les noeuds d'un réseau d'intégration qui est schématisé sur la figure 13.

L'examen des équations de Takagi (38) permet de constater que pour calculer les amplitudes des ondes en un noeud T de coordonnées (s_0, s_k) dans le repère du triangle de Borrmann (figure 13), il suffit de connaître \mathcal{D}'_0 et \mathcal{D}'_k au noeud S de coordonnées $(s_0 - p, s_k)$ et au noeud R de coordonnées $(s_0, s_k - q)$. On voit donc que l'on va pouvoir calculer pas à pas les amplitudes des ondes dans le cristal en partant du point source A de la face d'entrée jusqu'à la base BC du triangle sur la face de sortie, à condition de connaître les conditions aux limites sur les bords AB et BC du réseau d'intégration.

Epelboin et Riglet (1979) ont discuté en détail les conditions aux limites pour différentes géométries. Dans le cas de Laue, et d'une onde incidente sphérique, ces conditions s'écrivent:

$$\mathcal{D}'_0 = \frac{\partial \mathcal{D}'_0}{\partial s_0} = \mathcal{D}'_k = \frac{\partial \mathcal{D}'_k}{\partial s_k} = 0 \quad (39)$$

le long de \vec{s}_0 et:

$$\begin{cases} \mathcal{D}'_0 = \mathcal{D}^{(e)} \\ \mathcal{D}'_k = \frac{\partial \mathcal{D}'_0}{\partial s_0} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{D}'_k}{\partial s_k} = -i\pi K \kappa_k \mathcal{D}^{(e)} \end{cases} \quad (40)$$

sur la face d'entrée du cristal. Ceci se traduit dans le calcul par $\mathcal{D}'_0 = 1$ et $\mathcal{D}'_k = 0$ au point source A de la face d'entrée, et $\mathcal{D}'_0 = \mathcal{D}'_k = 0$ sur les bords du triangle de Borrmann le long de \vec{s}_0 et \vec{s}_k .

3.-PRINCIPE DU CALCUL DE LA DEFORMATION:

Lors du calcul des amplitudes des ondes en un point T du cristal, la déformation due au défaut intervient par l'intermédiaire du terme β'_k contenu dans W (38). Notons que ce terme β'_k , dont l'expression est donnée par (31), doit être évalué au point W situé entre les noeuds R et T (figure 13).

Dans le cas des dislocations linéaires, Stroh (1958) a appliqué la théorie anisotrope de l'élasticité au calcul de la déformation $\bar{u}(r)$. On trouve un exposé de cette méthode de calcul dans le livre "Theory of dislocations" de Hirth et Lothe (1968); c'est pourquoi seuls les résultats en sont présentés ici.

On se place dans un repère $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3)$ tel que l'axe \bar{x}_3 soit parallèle à la ligne de la dislocation: le problème présente une symétrie cylindrique et la déformation est ainsi indépendante de la coordonnée x_3 , ce qui simplifie les équations. Il est possible de montrer que dans ce repère les déplacements s'écrivent:

$$u_k = \operatorname{Re} \left[-\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 A_k(n) D(n) \operatorname{Log}(x_1 + p_n x_2) \right] \quad k=1,3 \quad (41)$$

où les A_k doivent vérifier le système d'équations linéaires:

$$\left[C_{i1k1} + (C_{i1k2} + C_{i2k1}) p_n + C_{i2k2} p_n^2 \right] A_k(n) = 0 \quad k=1,3 \quad (42)$$

C_{ijkl} étant les éléments du tenseur des constantes élastiques.

Pour que le système (42) ait des solutions il faut que son déterminant soit nul, ce qui donne une équation du sixième degré en p . Pour chaque racine $p(n)$ de cette équation, la résolution du système (42) permet de déterminer les $A_k(n)$, et il ne reste donc qu'à trouver les $D(n)$ pour pouvoir calculer les déplacements.

Pour ce, on considère un circuit situé dans la zone de bon cristal et entourant le coeur de la dislocation. Le fait que ce circuit doive présenter un défaut de fermeture égal au vecteur de Burgers \bar{b} de la dislocation impose:

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{n=1}^3 \pm A_k(n) D(n) \right] = b_k \quad k=1,3 \quad (43)$$

(Le signe - correspond au cas où la partie imaginaire de p est négative).

D'autre part la condition d'équilibre des contraintes le long d'un circuit entourant la dislocation donne:

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{n=1}^3 \pm (C_{112A1} + C_{112A2} p_n) A_A(n) D(n) \right] = 0 \quad A = 1, 3 \quad (44)$$

La réunion des équations (43) et (44) permet de déterminer les trois complexes $D(n)$. Le calcul du déplacement \bar{u} en un point quelconque de coordonnées (x_1, x_2) est alors possible grâce aux équations (41).

Cette méthode de calcul de la déformation due à une dislocation, dans le cas général tenant compte de l'anisotropie du cristal, a d'abord été employée en microscopie électronique dans un programme sur ordinateur mis au point par Head (1973).

Epelboin (1974) a repris le programme de Head en lui apportant de légères modifications en vue de le généraliser à toutes les classes cristallines et au cas des rayons X, ce qui lui a permis de réaliser un programme de simulation d'image de dislocation en section.

B./-SIMULATION DE TRANSLATIONS

La première tentative de simulation de topographies en translation a été réalisée par Epelboin (1977). Pour des raisons de précision d'algorithme numérique, rappelées dans le paragraphe 1, cette tentative s'est soldée par un échec. Ceci a conduit Epelboin à réaliser un programme à pas variables pour les simulations de sections qui est décrit au paragraphe suivant.

Nous avons pu tester la validité de l'algorithme à pas variables et prouver la faisabilité des simulations de translations; cependant les temps nécessaires au calcul d'une image étaient trop longs.

L'utilisation du théorème de réciprocité (Kato 1968) dont le principe est rappelé au paragraphe 4 devait permettre d'économiser une partie du temps de calcul: mais comme nous le verrons dans les derniers paragraphes de ce chapitre les résultats obtenus grâce à cette méthode de calcul ne nous ont pas paru satisfaisants.

Dans le chapitre 3 nous montrerons que ce problème de temps de calcul peut être résolu par l'utilisation d'un processeur vectoriel.

1.-RAPPELS:

L'intensité $I(P)$ arrivant en un point P de la face de sortie d'un cristal lors d'une topographie en translation (figure 14) dépend de l'intensité totale tombant en tous les points de la face d'entrée situés entre A et B . Suivant Takagi (1969) on peut écrire:

$$i(P) = \int_{AB} |\varphi(P, \xi)|^2 |\mathcal{D}^{(a)}(\xi)|^2 K \gamma_0 d\xi \quad (45)$$

où $\varphi(P, \xi)$ est l'amplitude au point P de l'onde réfléchie due à la source d'abscisse ξ sur la face d'entrée, et $\mathcal{D}^{(a)}(\xi)$ l'amplitude de l'onde incidente en ξ .

$I(P)$ est indépendante de la répartition de l'intensité incidente entre A et E, et de la nature de l'onde utilisée. En particulier Kato (1961) puis Authier et Simon (1968) ont montré à l'aide du théorème de Parseval que l'expression de cette intensité était équivalente que l'onde incidente soit plane ou sphérique.

Ceci a conduit Epelboin (1977) à utiliser deux méthodes pour tenter de simuler des images de translation :

- la première consiste à ajouter les intensités dues à des ondes planes ayant des écarts à l'incidence de Bragg variables (figure 15-a):

$$i(P) = \int_{\Delta\theta_{\min}}^{\Delta\theta_{\max}} i(\Delta\theta) d(\Delta\theta) \quad (46)$$

où $I(\Delta\theta)$ est la contribution au point P de l'onde plane d'écart à l'incidence de Bragg $\Delta\theta$ et d'extension latérale infinie.

- dans la deuxième méthode, on ajoute les intensités dues à une onde sphérique dont le point source sur la face d'entrée est déplacé depuis O jusqu'à O' (figure 15-b):

$$i(P) = \int_A^B i(\xi) d\xi \quad (47)$$

où $I(\xi)$ est la contribution au point P du point source d'abscisse ξ (figure 14). Cette deuxième méthode correspond à l'expérience réelle.

Bien que théoriquement équivalentes, ces deux méthodes ont donné des résultats différents car leur mise en oeuvre conduit à des calculs numériques différents.

Les résultats obtenus à l'aide de l'intégrale (46) se sont révélés décevants, et la première méthode a dû être abandonnée. Epelboin a expliqué cet échec de la façon suivante:

avec cette méthode on ajoute les intensités dues à un grand nombre d'ondes planes ayant des écarts à l'incidence de Bragg $\Delta\theta$ qui varient entre une valeur minimale $\Delta\theta_{\min}$ et une valeur maximale $\Delta\theta_{\max}$, avec $\Delta\theta_{\min} = -\Delta\theta_{\max}$. Pour obtenir une précision suffisante dans le calcul de l'intensité intégrée, il est nécessaire de choisir le pas angulaire $d(\Delta\theta)$ séparant les écarts à l'incidence de Bragg de deux ondes planes successives, le plus petit possible ($< 10^{-6}$ radians); par contre il faut évidemment que $\Delta\theta_{\max}$ soit grand ($> 0.6 \cdot 10^{-4}$ radians).

Malheureusement , l'erreur dans le calcul de l'intensité due à une onde plane augmente à mesure que l'on augmente $\Delta\theta$. De plus, choisir un petit écart angulaire $d(\Delta\theta)$ et un grand $\Delta\theta_{\max}$ oblige à ajouter un grand nombre d'ondes planes; en conséquence les erreurs d'arrondi dans le calcul de l'intensité due à chaque onde s'ajoutent. De même , le temps de calcul augmente proportionnellement au nombre d'ondes planes ajoutées. Ces diverses raisons font que cette première méthode, qui n'a conduit qu'à des résultats instables, a dû être abandonnée.

Bien que les résultats obtenus lors de l'utilisation de l'intégrale (47) aient été meilleurs, la comparaison d'un profil d'intensité calculé (figure 16) avec un profil densitométrique expérimental (figure 17) fut peu satisfaisante. Sur le profil calculé, on observe en particulier des oscillations loin du coeur de la dislocation (indiqué par une flèche), là où l'intensité devrait tendre vers une valeur constante correspondant au cristal parfait.

Avec cette méthode, les problèmes viennent du fait que, dans les cas faiblement absorbants, la plus grande partie de l'intensité arrivant en un point P de la face de sortie du cristal (figure 14) provient des régions proches des bords PA et PB du triangle PAB. C'est justement près de ces bords que les amplitudes des ondes dans le cristal présentent des oscillations importantes qui étaient mal prises en compte par le pas de calcul du programme de l'époque. L'erreur qui en résultait lors du calcul de l'intensité, bien que peu importante pour la simulation des sections, devient intolérable dans le cas des translations.

Remarquons cependant que l'erreur commise lors du calcul de l'intensité due à une onde sphérique n'est importante que lorsque le faisceau incident est proche du point A ou B (figure 14), si bien que l'on peut estimer que l'erreur totale dans le calcul de l'intensité intégrée est de l'ordre de grandeur de celle commise pour quelques ondes planes seulement lors de l'emploi de la première méthode .

Cette première tentative de simulation d'image de dislocation en topographie en translation s'est donc soldée par un échec, mais a permis à Epelboin (1977) de conclure que la méthode de simulation basée sur l'intégrale (47) était meilleure que celle par addition d'ondes planes. Pour obtenir des résultats plus précis il aurait fallu diminuer les pas d'intégration mais ceci aurait conduit à des temps de calcul trop importants pour espérer faire des simulations dans la pratique.

2.-PROGRAMME A PAS VARIABLES POUR SIMULATION DE SECTIONS:

Les difficultés exposées à la fin du paragraphe précédent ont conduit Epelboin (1981 et 83) à élaborer un nouveau programme de simulation de sections, appelé DEFV. De même que Petrashen (1976),

Epelboin a remplacé le pas fixe du réseau d'intégration utilisé habituellement par un pas variable dont la taille est adaptée à la variation locale des amplitudes des champs d'ondes. La difficulté était de trouver un critère permettant de choisir à l'avance des pas de taille convenable.

On sait que dans un cristal parfait, l'intensité des franges de Kato obtenues lors d'une topographie en pose fixe est proportionnelle à la fonction de Bessel J_0 dont l'allure est représentée sur la Figure 18. Le programme DEFV calcule approximativement les zéros de cette fonction, puis choisit les tailles des pas de calcul sur la face de sortie du cristal de manière à ce que l'on ait un certain nombre de points entre deux zéros successifs. Le réseau d'intégration est alors construit en traçant à partir de ces points des lignes parallèles aux directions incidente et réfléchie, comme le montre la Figure 19-a. Les pas de calcul ainsi choisis décroissent près des bords du triangle de Borrmann, ce qui permet de tenir compte des oscillations rapides des amplitudes des champs d'ondes dans ces régions.

Epelboin (1975) a montré que l'interaction de la dislocation et des champs d'ondes est plus faible au fur et à mesure que le défaut se rapproche du côté droit du triangle de Borrmann. C'est pourquoi le réseau d'intégration n'est pas symétrique mais possède un nombre supérieur de grands pas de ce côté (figure 19-a).

Lorsque les régions fortement déformées environnant la ligne de la dislocation sont coupées par le faisceau réfracté de direction \vec{S}_0 , il y a formation de l'image directe du défaut qui se traduit par des champs d'ondes se propageant selon \vec{S}_A et dont les amplitudes varient de façon très importante. Il est donc nécessaire de réduire aussi les pas de calcul dans ces régions, ce qui amène à construire pour ce cas un deuxième réseau d'intégration, représenté Figure 19-b.

Ce nouveau programme DEFV a permis de calculer des sections de meilleure qualité (en particulier sur les bords et dans la zone de l'image directe) en des temps deux à trois fois plus courts. Par exemple la figure 20 présente la simulation de la topographie en pose fixe de la figure 10.

De plus Epelboin et Authier (1983) ont pu étudier à l'aide de simulations l'influence sur le contraste des dislocations de la largeur de la fente limitant le faisceau incident. En effet lors d'une topographie en pose fixe la largeur de la fente numéro 1 (figure 9) est au minimum de 10 microns. Aristov et al. (1982) ont montré que l'on pouvait prendre en compte cette largeur de fente en considérant comme conditions aux limites à la surface du cristal non plus un seul point source mais une série de sources indépendantes. Epelboin et Authier ont ainsi réalisé des simulations en ajoutant plusieurs sections élémentaires calculées avec le programme à pas variables. Ceci a permis de montrer que lorsque la largeur de la fente simulée augmente, les franges de Kato se brouillent sur les bords de la section (car c'est là qu'elles sont plus fines), l'image directe s'élargit et dans certains cas des franges de l'image intermédiaire peuvent être très atténuées. Comme le montre la

simulation de la figure 21, les images ainsi obtenues sont plus proches des photographies expérimentales (figure 10).

Mais la mise au point de DEFV représente aussi une étape décisive pour la simulation des translations: en effet, comme nous le verrons plus loin, le programme que nous avons réalisé est construit à partir de celui d' Epelboin.

3.-TEST DE LA VALIDITE DE L'ALGORITHME NUMERIQUE:

Notre premier travail a consisté à reprendre la deuxième méthode de calcul, dans laquelle on ajoute les intensités dues à une onde sphérique dont le point source se déplace, mais en utilisant cette fois le programme à pas variables DEFV. A titre de test nous avons choisi la dislocation déjà citée en exemple dans les paragraphes précédents. Un profil expérimental, situé légèrement au dessus du milieu de l'image en translation de la dislocation (figure 12), et obtenu par densitométrie de la plaque photographique, est représenté sur la figure 22.

En comparant le profil calculé (figure 23) avec le profil expérimental, et en faisant abstraction des oscillations dues aux grains de la plaque photographique sur ce dernier, on constate un assez bon accord entre les deux courbes.

Nous avons effectué plusieurs tests et ceci nous a permis de montrer qu'il était théoriquement possible d'effectuer des simulations d'images de dislocation en topographie en translation à l'aide de l'intégrale (47).

Malheureusement, le calcul de ce profil d'intensité a demandé 9 heures sur le mini-ordinateur du laboratoire (Mini 6/53 de Bull). Or la simulation d'une image entière aurait nécessité le calcul d'au moins une centaine de tels profils ce qui était évidemment irréalisable dans la pratique. Nous avons alors envisagé d'effectuer les simulations sur les ordinateurs du C.I.R.C.E.; mais une évaluation du temps de calcul de l'image envisagée nous a donné un ordre de grandeur de 100 heures sur l'IBM 370/168 et de 45 heures sur l'AMDHAL V7, ce qui n'était pas raisonnable du point de vue temps et encore moins du point de vue financier!.

Une autre méthode de simulation suggérée par Kato a alors retenu notre attention.

4.-THEOREME DE RECIPROCITE APPLIQUE AUX TRANSLATIONS:

Kato (1968) a proposé une troisième méthode pour le calcul de l'intensité diffractée dans le cas des topographies aux rayons X en translation. Cette méthode, basée sur l'emploi du théorème de réciprocité, est brièvement résumée dans les lignes qui suivent.

Pour raisonner il est commode de se placer dans un repère lié

au cristal: celui-ci et la plaque photographique sont donc immobiles alors que la source de rayons X se déplace, ce qui est évidemment équivalent à l'expérience réelle. L'intensité totale arrivant en un point Q de la plaque photographique (figure 24) est la projection de l'intensité réfléchie arrivant au point P de la face de sortie du cristal lors de la translation. Comme nous l'avons vu antérieurement, cette intensité provient de la région limitée par les points A et B de la face d'entrée.

Considérons l'instant précis où la source de rayons X est située en S (figure 24), le faisceau incident atteignant le cristal en Ai. L'amplitude de l'onde arrivant en Q pour cette position Ai du point source sera notée $D_{\lambda}^{(i)}$. D'après Kato (1968) et à cause du théorème de réciprocité nous pouvons intervertir le rôle de la source S et du point d'observation Q (figure 25): ainsi une source de même intensité que précédemment et placée en Q donnera en S la même amplitude $D_{\lambda}^{(i)}$.

Comme ce raisonnement peut s'appliquer à chaque instant, c'est-à-dire pour chaque position de la source, on en déduit que l'intensité totale reçue en Q lors de la translation réelle n'est autre que la somme des intensités réfléchies lors d'une topographie en pose fixe fictive qui serait réalisée avec une source située au point Q considéré, les rôles des faces d'entrée et de sortie étant inversés. (Pour simplifier nous nous sommes placé ici dans un cas symétrique; dans le cas général il faut multiplier par $\cos\psi_s/\cos\psi_o$ les intensités de la section).

Outre son élégance, l'avantage principal de la méthode proposée par Kato est de ne nécessiter le calcul que d'une seule section pour obtenir l'intensité en un point de la photographie. De plus elle permet de découpler le pas de calcul sur la face de sortie du cristal du pas de calcul du réseau d'intégration. En effet le choix des points P où l'on va calculer l'intensité est tout à fait libre: rien n'empêche donc de resserrer les points dans les régions où l'on sait que l'intensité varie vite (image directe) et au contraire de les espacer là où l'influence de la dislocation se fait moins sentir. En conséquence cette méthode laissait espérer un gain appréciable de temps de calcul nécessaire à la simulation d'une image.

5.-PROBLEMES RENCONTRES:

Nous avons écrit un programme de simulation de translations (TRANSL) par la méthode proposée par Kato.

Il était bien sûr intéressant de commencer par simuler le même profil d'intensité qu'avec la méthode par addition d'ondes sphériques pour pouvoir comparer les résultats entre eux, et avec le profil densitométrique expérimental. La courbe obtenue, représentée sur la figure 26, a demandé 4h45mn de calcul au lieu de 9h00mn avec la méthode par addition d'ondes sphériques. Notons cependant qu'en prenant des points plus espacés sur la plaque photographique on peut réduire ce temps de moitié tout en gardant une précision raisonnable dans la définition de la courbe.

On constate que l'image directe de la dislocation, qui se présente comme un pic très marqué sur la courbe obtenue par la méthode 2 (figure 23), est ici presque inexistante ce qui concorde mal avec l'expérience. De plus les oscillations proches de ce pic, qui correspondent à l'image intermédiaire, sont différentes. Ailleurs l'accord entre les deux courbes est meilleur.

Pour confirmer ou infirmer ce résultat, nous avons simulé d'autres profils d'intensité pour des dislocations situées à des profondeurs variables dans des cristaux de différentes natures (Si, Ga-As, KDP). Dans tous les cas nous avons constaté que l'image directe du défaut était sous estimée par la méthode de Kato, et que même dans les régions éloignées de l'image directe, l'accord entre les résultats des deux méthodes n'était pas toujours très bon. Les figures 27 et 28 en sont un exemple.

6.-CAUSE PROBABLE DE CES PROBLEMES:

Afin de tenter de comprendre pourquoi la méthode utilisant le principe du retour inverse de la lumière ne donne pas les mêmes résultats que celle par addition d'ondes sphériques, nous avons étudié ce qui se passait au niveau des sections et non plus seulement au niveau de la translation. Pour ce nous avons simulé puis sélectionné un certain nombre de sections pour lesquelles l'image directe se présentait sous la forme d'un pic suffisamment intense. La figure 29 est un exemple de ces sections: le pic de l'image directe est large et très grand par rapport aux franges de Kato. Comme sur le schéma de la figure 24, appelons Q le point de la photographie simulée qui nous intéresse: dans notre exemple le maximum du pic de la figure 29 (intensité = 4.3 en unité arbitraire).

Nous avons ensuite, pour chaque section sélectionnée, simulé l'expérience inverse, c'est-à-dire que nous avons supposé que l'on plaçait la source de rayons X au point Q comme sur la figure 25. On aurait dû alors retrouver au point S la même intensité qu'au point Q.

Dans le cas cité en exemple, la simulation réciproque a donné la courbe de la figure 30 où le point d'observation S est indiqué par une flèche. L'intensité n'y est que de 0.2 environ, mais on constate la présence d'un pic de 2.5 juste à gauche du point S: on peut raisonnablement supposer que pour des raisons d'échantillonnage de pas de calcul, c'est en fait ce pic d'intensité qui correspond à S et qu'il est légèrement décalé, ce qui importe peu lors du calcul des translations puisqu'on somme toutes les intensités de la section. Ce qui par contre est important, c'est que la valeur de l'intensité de ce pic est trop faible par rapport à ce qu'elle devrait être théoriquement. Pour toutes les sections réciproques simulées, sauf une, nous avons obtenu une intensité plus faible que prévue ce qui explique pourquoi sur les translations l'image directe est sous estimée avec cette méthode.

La cause probable de cette mauvaise simulation du principe de retour inverse de la lumière, lorsque l'on est dans la zone de

l'image directe, nous semble provenir de problèmes numériques lors de l'intégration des équations de Takagi dans la région fortement déformée entourant le coeur de la dislocation, et ce malgré le raffinement du réseau d'intégration dans cette région. Ces problèmes sont sans doute analogues à ceux rencontrés lors de la tentative de simulation de translation par Epelboin (1977) sur les bords du triangle de Borrmann et dans la zone de l'image directe, problèmes qui l'ont conduit justement à la réalisation du réseau à pas variables.

Pour obtenir des résultats corrects avec la méthode de Kato, il faudrait probablement diminuer encore considérablement les pas de calcul près du coeur de la dislocation. Mais ceci reviendrait à perdre, pour intégrer les équations de Takagi sur un réseau plus serré, le temps de calcul que l'on devait gagner grâce à cette méthode.

Une autre possibilité envisageable serait d'utiliser une méthode numérique plus précise telle que celle proposée par Nourtier et Taupin (1981) à la place de la méthode de la dérivée au demi-pas: mais comme cela demanderait des calculs plus longs on serait confronté au même problème de temps.

Le théorème de réciprocité a aussi été utilisé pour calculer des profils de translations par Petrashen et al. (1978 et 1980). Les profils d'intensité qu'ils ont présentés dans leurs publications ne sont pas assez précis pour nous permettre de porter un jugement quant à la validité de leurs résultats. Nous noterons cependant qu'à notre connaissance ils n'ont pas comparé leurs profils avec ceux obtenus à l'aide d'une autre méthode de calcul quel qu'elle soit.

C./-CONCLUSION

Nous avons vu que pour simuler des images de dislocation en topographie en translation nous disposons de trois méthodes:

-Méthode 1: addition des intensités dues à des ondes planes ayant des écarts à l'incidence de Bragg variables.

-Méthode 2: addition des intensités dues à une onde sphérique dont le point source se déplace.

-Méthode 3: sommation des intensités d'une section fictive réalisée en plaçant la source de rayons X au point d'observation.

Epelboin (1977) a montré que la méthode 2 était meilleure que la méthode 1. Poursuivant son travail nous avons prouvé qu'il était possible de faire des simulations grâce à la deuxième méthode, mais il se posait un problème de temps de calcul.

La méthode 3 semblait la plus attirante, mais les résultats que nous avons obtenus lors de son emploi ne nous ont pas paru satisfaisants. Petrashen et al. (1978 et 80) affirment pourtant, sans avoir pu cependant simuler d'image, que pour des raisons de temps de calcul la méthode 3 est la seule possible pour réaliser des simulations de translation.

Cette affirmation est erronée: nous avons en effet écrit un programme de simulation de translation qui utilise la méthode 2. Il

sera décrit au prochain chapitre.

- CHAPITRE 3 -

LE PROGRAMME DE SIMULATION DE TRANSLATIONS:

A./-Généralités.

- 1.-Introduction
- 2.-Le processeur vectoriel FPS100
- 3.-Principes d'organisation

B./-Réalisation.

- 1.-Le programme INIT
- 2.-Calculs préparatoires
- 3.-Calcul d'une ligne d'image
 - a) Introduction
 - b) Intensité réfléchie pour une position du point source
 - c) Eclatement, sommation et apodisation
 - d) Réduction du temps de calcul
- 4.-Système de sauvegardes

C./-Visualisation des images.

- 1.-Importance de la visualisation
- 2.-Différentes méthodes employées
- 3.-Visualisation sur Péricolor 2000

Dans ce chapitre nous présentons les programmes utilisés pour la simulation des images de dislocation en translation, et plus particulièrement le programme de calcul ADELE. Après des généralités concernant l'organisation d'ensemble du logiciel, ainsi que la machine sur laquelle sont effectués les calculs, nous décrivons de manière plus détaillée ces programmes. Une partie de cette description a été rejetée dans des annexes afin de ne pas alourdir le texte.

A.-GENERALITES

1.-INTRODUCTION:

La figure 31 présente l'ensemble des outils informatiques mis en oeuvre pour la simulation des images de dislocation en translation. Du point de vue logiciel cet ensemble est composé de trois programmes:

- Le programme INIT permet d'entrer de manière conversationnelle les données nécessaires à la simulation, et effectue les initialisations indispensables pour l'exécution du programme de calcul ADELE. Ses différentes utilisations possibles seront indiquées au paragraphe B-1.

- Le programme ADELE comporte une première partie de calculs préparatoires exécutée sur mini ordinateur (Mini6 de Bull). Cette exécution ne demande qu'un temps de calcul de l'ordre de la minute. Par contre, la simulation de l'image serait beaucoup trop longue si elle était effectuée sur le Mini6. C'est pourquoi, pour accélérer l'intégration des équations de Takagi, on utilise un processeur vectoriel qui sera décrit au paragraphe 2.

- Le dernier programme VISUAL sert à envoyer l'image simulée sur une console de traitement d'image afin de la comparer à la topographie expérimentale. La visualisation des images calculées fera l'objet du paragraphe C.

2.-LE PROCESSEUR VECTORIEL FPS100:

Un processeur vectoriel est un véritable ordinateur qui travaille sous la direction d'un ordinateur "hôte" en parallèle avec celui-ci. C'est une machine qui a été conçue spécialement pour le calcul scientifique. Si on l'utilise simplement à partir d'un programme Fortran elle atteint son efficacité maximum lorsque ces calculs portent sur des vecteurs, où plus généralement des tableaux. On peut cependant profiter de la puissance du processeur vectoriel pour effectuer n'importe quel type de calcul à condition de le programmer en langage assembleur: c'est ce que nous avons fait pour l'intégration des équations de Takagi.

Le FPS100 a été construit avec des circuits intégrés rapides, ce qui lui donne un temps de cycle machine de 250 ns. Les nombres flottants qu'il utilise sont représentés par des mots de 38 bits avec 10 bits pour l'exposant et 28 pour la mantisse. Ceci permet l'emploi de nombres allant environ de $\pm 10^{-15}$ jusqu'à $\pm 10^{+15}$. Les calculs effectués sont ainsi précis (9 chiffres significatifs) et les erreurs d'arrondi faibles lors de calculs itératifs.

L'architecture interne du FPS100 est représentée sur la figure 32. Elle se compose de trois unités logiques pouvant fonctionner indépendamment les unes des autres:

- l'additionneur flottant (FA) est un additionneur de structure "pipe-line" à deux étages. Le temps nécessaire à une addition seule est donc de 2 cycles soit 500 ns, mais du fait de la structure pipe-line il faut $n+1$ cycles seulement pour faire n additions successives.
- le multiplieur flottant (FM) est lui aussi de type pipe-line mais à trois étages. L'exécution d'une multiplication seule demande 3 cycles = 750 ns, mais pour n multiplications successives il ne faudra que $n+2$ cycles.
- l'unité arithmétique et logique (ALU) qui opère sur des nombres entiers de 16 bits. Ces nombres sont contenus soit dans les 16 registres de travail (S-Pad) utilisés en particulier comme compteurs de boucle, soit dans les 3 registres d'adresses (Ad.R) de la mémoire table, de la mémoire principale de données et des registres flottants.

Le FPS100 est composé de mémoires distinctes pouvant être lues simultanément:

- la mémoire table (TM) où le constructeur a stocké des constantes utiles ainsi que des tables de valeurs (sinus ou cosinus par exemple). C'est la seule mémoire qui ne peut être que lue (ROM).
- la mémoire principale de données (MD) de 32 kmots de 38 bits. La lecture d'un mot se fait en trois cycles machine.
- la mémoire programme (PS) qui permet de stocker le programme qui doit être exécuté par le FPS100. Cette mémoire a une capacité de 4 kmots, chaque mot d'instruction faisant 64 bits.
- 64 registres flottants (DPX et DPY) qui peuvent être lus et écrits en un seul cycle. Ces registres sont très utiles pour stocker des résultats de calculs intermédiaires.

De nombreux bus parallèles (lignes pour faire transiter les informations) relient les différentes parties de la machine.

L'annexe 4 présente quelques notions de bases sur l'utilisation du processeur vectoriel FPS100.

3.-PRINCIPES D'ORGANISATION:

Une image est constituée de lignes correspondant chacune à un plan d'incidence. Le calcul d'une ligne est indépendant de celui des autres. Le programme ADELE opère donc de façon répétitive: il calcule les lignes de l'image les unes après les autres de la même

manière. Le principal paramètre qui change d'une ligne à la suivante est la position du coeur de la dislocation dans le plan d'incidence considéré.

La simulation complète d'une image en translation demande un temps de calcul long: de quelques heures à quelques dizaines d'heures. Un tel temps n'est généralement pas disponible en une seule fois. Il est donc nécessaire de pouvoir arrêter la simulation d'une image au bout d'un temps déterminé, et de la reprendre plus tard au stade où elle en était.

De plus pendant des durées aussi longues, rien ne garantit que le système d'exploitation ne va pas s'arrêter pour une raison quelconque.

C'est pourquoi nous avons inclus dans notre programme un système de sauvegardes, avec possibilité de redémarrage automatique. Le principe en est le suivant:

le programme écrit alternativement dans deux fichiers, à la fin du calcul de chaque ligne d'image, les valeurs de toutes les variables nécessaires au calcul de la ligne suivante. En cas d'arrêt volontaire ou non, le programme choisira au redémarrage le fichier de sauvegarde le plus ancien (car on n'est pas assuré que l'arrêt n'a pas eu lieu pendant l'écriture du plus récent) pour y lire les valeurs des variables sauvegardées. Puis la simulation se poursuivra avec ces valeurs. La perte de temps maximum qui en résulte est donc égale au temps de calcul de deux lignes d'image.

B./-REALISATION

1.-LE PROGRAMME INIT:

Les données pour le programme ADELE sont entrées de manière conversationnelle grace au programme INIT. Celui-ci peut être utilisé de trois manières différentes.

-La première permet de créer un fichier de données entièrement nouveau. L'utilisateur entre successivement au clavier la valeur des données demandées par le programme, puis contrôle ces valeurs qui s'affichent sur l'écran pour une correction éventuelle (figure 35). INIT génère alors le fichier de données DATA2, ainsi que deux fichiers d'aiguillage SCV1 et SOV2 qui contiennent en particulier la valeur du nombre maximum de plans calculés (MAXPL) que le programme ADELE ne devra pas dépasser. C'est en choisissant ce paramètre MAXPL que l'utilisateur fixe le temps de calcul au bout duquel la simulation s'arrêtera.

-La deuxième option permet de créer un nouveau fichier de données DATA2 à partir d'un fichier déjà existant DATA1, en affectant de nouvelles valeurs aux données que l'on désire modifier.

-La troisième utilisation de INIT a pour but de reprendre la simulation d'une image non terminée. L'utilisateur se contente de

modifier la valeur de MAXPL dans les fichiers SOV1 et SOV2, puis de relancer le calcul.

2.-CALCULS PREPARATOIRES:

Grace au contenu des fichiers d'aiguillage SOV1 et SOV2, le programme ADELE sait s'il doit débiter une nouvelle simulation ou poursuivre un calcul déjà commencé. Dans ce dernier cas (figure 35) on évite toute une série de calculs préliminaires: le programme se contente de lire dans les fichiers de sauvegarde les variables nécessaires à la reprise de la simulation.

Par contre dans le premier cas le programme doit effectuer des calculs préparatoires. Ces calculs font appel à de nombreux sous programmes très semblables à ceux du programme DEFV de simulation de sections d'Epelboin. Nous ne donnerons ici que le but de ces calculs et on se reportera à la notice d'utilisation de DEFV (1980) pour une description détaillée.

Les calculs préparatoires peuvent se résumer à six étapes (figure 36):

-La première consiste à lire les données contenues dans le fichier DATA2. Certaines de ces données, le vecteur de Burgers par exemple, sont exprimées dans le repère cristallographique, alors que d'autres comme la ligne de la dislocation sont fournies dans le repère utilisateur de la figure 45. Le tenseur des constantes élastiques C_{ij} est lui donné dans le repère orthonormé utilisé en élasticité.

-Le rôle de la deuxième étape réalisée par le sous programme DEFAULT est d'établir les matrices de changement de bases entre les différents repères utilisés. Ces repères sont schématisés sur la figure 37. Ceci permet d'exprimer les données dans le repère où elles seront utilisées: généralement celui lié à la dislocation.

-Dans la troisième étape le sous programme ANCALC détermine les constantes nécessaires au calcul des déformations dans le repère lié à la dislocation. Epelboin (1974) a calculé dans l'annexe 1 de sa thèse le terme $\partial[\lambda_{\alpha\beta}]/\partial\lambda_{\alpha\beta}$ intervenant dans l'expression (31) de β_{α} . Il a montré que ce terme pouvait s'exprimer uniquement en fonction des coordonnées (x_1, x_2) du point W considéré (figure 13) et de douze constantes. Ces constantes sont calculées lors de la troisième étape.

-Puis le sous-programme DIRECT va estimer, à l'aide du critère (37) donné au paragraphe C-2 du chapitre 1, la largeur de la zone située autour de la ligne de la dislocation qui donne naissance à l'image directe. Comme ce critère n'est qu'approximatif, on a introduit un paramètre supplémentaire pour permettre à l'utilisateur d'ajuster la taille de la zone à celle de l'image directe expérimentale quand elle est connue, comme dans le cas de l'étude de Miltat et Bowen (1975). Cette largeur sera utilisée plus tard pour

calculer le réseau d'intégration avec raffinement.

-Dans la cinquième étape, le sous-programme RESEAU établit le réseau d'intégration des équations de Takagi: il s'agit du réseau normal de la figure 19-a. Les pas de calcul sur la face de sortie varient entre une valeur minimale (PINIT) et une valeur maximale (PMAX). Notons que l'utilisateur peut grâce à une donnée du programme influencer sur la taille des pas de calcul comme cela est indiqué dans un tableau de l'annexe 6.

-La dernière étape des calculs préparatoires concerne le processeur vectoriel et débute par la détermination des adresses des variables qui vont lui être transmises. Elle se poursuit par le calcul de constantes utiles pour l'intégration des équations dans le FPS100. Nous avons en effet rejeté en tête du programme une partie des calculs qui pouvaient être effectués à l'avance.

Lors de la simulation d'une image complète le calcul compris dans la boucle la plus interne du programme peut s'effectuer jusqu'à 10^8 fois. D'où la nécessité d'optimiser ce calcul au maximum. Par exemple la durée d'une division dans le processeur vectoriel est de 5500 ns alors que celle d'une multiplication n'est que de 750 ns; en conséquence si des variables doivent être divisées par une constante dans la boucle la plus interne du programme, il est plus astucieux de calculer à l'avance une fois pour toute l'inverse de la constante dans le mini ordinateur, puis de transférer cet inverse dans le FPS100 afin d'avoir à effectuer seulement des multiplications.

3.-CALCUL D'UNE LIGNE D'IMAGE:

a) Introduction:

Le calcul d'une ligne d'image se fait par la deuxième méthode présentée au chapitre 2, à l'aide de l'intégrale (47).

Pour obtenir la ligne d'image comprise entre les points P1 et P2 de la plaque photographique (figure 38) le programme déplace successivement le point source sur la face d'entrée depuis la position A1 jusqu'à An. Pour chaque position Ai, il calcule la répartition de l'intensité dans le faisceau réfléchi qui impressionne la plaque, et ajoute ces intensités à celles calculées précédemment pour les positions antérieures.

b) Intensité réfléchie pour une position du point source:

L'algorithme de calcul des amplitudes D'_s sur la face de sortie du cristal pour une position donnée Ai du point source est le suivant:

soit NM le nombre de pas de calcul le long des bords du réseau d'intégration (figure 39). Les lignes du réseau parallèles à la direction s_0 sont repérées par un indice J et le programme travaille successivement sur ces lignes depuis J=2 jusqu'à J=NM (sur la ligne J=1 les amplitudes des ondes ont été initialisées à zéro pour simuler les conditions aux limites).

Sur une ligne J donnée, les noeuds du réseau sont repérés par un indice I. ADELE calcule \mathcal{D}'_i et \mathcal{D}''_i à chaque noeud par intégration des équations de Takagi, depuis $I=2$ jusqu'à $I=NM-J+2$, c'est-à-dire jusqu'au noeud de la ligne J situé sur la face de sortie.

On remarque que grâce à cet algorithme on peut se contenter de stocker en mémoire uniquement les valeurs des amplitudes sur une ligne pour calculer la ligne suivante.

Signalons que pour utiliser le processeur vectoriel il était nécessaire de séparer dans les équations de Takagi (38) les parties réelles des parties imaginaires. Ceci conduit à un système d'équations faisant intervenir une matrice (4x8), mais dont seuls douze termes sont indépendants.

c) Eclatement, sommation et apodisation:

Dans le réseau d'intégration à pas variables, les distances entre les points de la face de sortie où l'on calcule l'intensité sont toutes un multiple du pas minimum de calcul. Pour pouvoir sommer les intensités dues à chaque position A_i du faisceau incident, il est indispensable de se ramener d'abord à un échantillonnage de points équidistants. Dans ce but on effectue un "éclatement" des points calculés (figure 40). Cet éclatement consiste simplement à rajouter de nouveaux points aux emplacements nécessaires en leur affectant une intensité calculée par interpolation linéaire.

Après éclatement, le programme ajoute les intensités calculées pour une position A_i du point source, dans un tableau final qui correspond à la zone de la face de sortie du cristal située entre Ω_1 et Ω_2 (figure 38 et 40). Cette addition se fait avec un décalage des points correspondant à la distance AA_i , ce qui explique pourquoi cette distance doit être aussi un multiple du pas minimum de calcul.

Lorsque l'on est arrivé à la position A_n du point source (figure 38) et que l'on a sommé toutes les intensités, le tableau final contient un nombre considérable de points. Laisser ce tableau sous cette forme reviendrait à sortir des images ayant par exemple 2000x2000 points ce qui représente une information gigantesque, difficilement maniable et ne pouvant pas être affichée en une seule fois sur un écran. De plus, la distance entre ces points est de 0.2 micron pour l'option standard du programme, alors que la résolution théorique d'une plaque photographique expérimentale est au mieux de 1 micron.

C'est pourquoi on réduit cette information en effectuant une "apodisation". Cette apodisation est équivalente à une sommation en triangle des intensités (figure 40), en vue de se ramener à un pas moyen de représentation de 0.8 micron minimum ou à un multiple de 0.8. Dans le processus d'apodisation deux points finaux adjacents ne sont pas indépendants mais partagent une partie de l'information d'origine; ceci reproduit le comportement des grains d'une plaque photographique.

Les tailles d'images sont limitées au standard de 1024 points maximum par ligne, mais dans la pratique les images courantes font plutôt 200 à 400 points.

d) Réduction du temps de calcul:

La réduction du temps de simulation d'une image est réalisée grâce à différents moyens. Le premier dont nous avons déjà parlé consiste à utiliser un processeur vectoriel programmé en assembleur pour intégrer les équations de Takagi. Le second est de ne calculer qu'un plan d'incidence sur deux ou trois. Les plans manquants sont obtenus par interpolation linéaire.

Le dernier moyen décrit ci-dessous consiste à ne calculer la propagation des ondes que dans une partie des triangles de Borrmann.

Pour calculer l'intensité reçue sur la plaque photographique entre les points P1 et P2 (figure 38) il suffit de connaître les valeurs de D'_A sur la face de sortie du cristal entre Ω_1 et Ω_2 . Nous constatons donc que pour un point situé près de A1 (ou de An) il est inutile de calculer la propagation des ondes dans tout le triangle de Borrmann. Trois cas peuvent se présenter (figure 41):

-dans le premier cas où le point source se situe du côté de A1 on interdit à l'indice I, qui repère les noeuds du réseau sur une ligne (figure 39), de dépasser une certaine valeur IMAX dépendant de la distance de A1 au point source Ai considéré. La zone du triangle de Borrmann où l'on calcule les amplitudes se limite à la partie hachurée sur la figure 41.

-dans le cas 2 le calcul des amplitudes des ondes doit être réalisé entièrement sur tout le réseau d'intégration.

-si le point source est situé du côté de An, cas numéro 3 de la figure 41, on interdit à l'indice J, repérant les lignes du réseau (figure 39), de dépasser une certaine valeur JMAX dépendant de la distance AiAn. Les valeurs de IMAX et JMAX sont calculées par le sous programme DIJMAX.

Remarquons que si $\Omega_1\Omega_2$ est petit ou si l'angle de Bragg est grand, on peut avoir simultanément le cas 1 et 3, le cas 2 étant inexistant.

Le gain de temps ainsi obtenu dépend de l'épaisseur du cristal, de l'angle de Bragg et de la largeur de l'image simulée. Par exemple pour un cristal de 800 microns d'épaisseur avec $\theta=10.66$ degrés et $\Omega_2-\Omega_1 = 180$ microns, on gagne un tiers du temps de calcul.

On trouvera dans l'annexe 5 une description du sous-programme PL qui calcule une ligne d'image dans le FPS100. Le tableau de la figure 44 permet de comparer son temps d'exécution, dans le cas d'un cristal de 800 microns d'épaisseur et d'une ligne d'image de 180 microns de large, avec ceux obtenus sur d'autres ordinateurs. On constate que grâce à la programmation du processeur vectoriel en assembleur, le temps de calcul en local est meilleur que ceux des ordinateurs du CIRCE.

4.-SYSTEME DE SAUVEGARDES:

La nécessité d'un système de sauvegardes, ainsi que son principe, ont été expliqués au paragraphe A-3.

Ce système emploie deux fichiers de sauvegarde que nous désignerons sous les noms de SAUV1 et SAUV2, leurs noms réels étant choisis par l'utilisateur. Le programme ADELE écrit alternativement dans ces fichiers, à la fin du calcul de chaque ligne d'image, les valeurs de toutes les variables nécessaires au calcul de la ligne suivante.

Deux autres petits fichiers SOV1 et SOV2, qui n'ont que deux enrégistrement, servent d'aiguillage. SOV1 contient entre autre le numéro NUMPL1 de la ligne d'image dont le calcul était terminé quand a été effectuée la sauvegarde des variables dans le fichier SAUV1. De même SOV2 contient le numéro NUMPL2 de la ligne d'image dont le calcul était terminé lors de l'écriture du fichier SAUV2.

L'ensemble du système de sauvegarde est symbolisé sur la figure 35.

Cas où l'on débute une simulation:

Dans le cas particulier où l'on débute une simulation, les fichiers SAUV1 et SAUV2 n'existent pas encore puisqu'aucun calcul n'a été fait. Par contre le programme INIT a généré les fichiers d'aiguillage SOV1 et SOV2 en initialisant les variables NUMPL1 et NUMPL2 à zéro. Le programme ADELE qui débute par la lecture de ces variables sait donc aussitôt que le calcul commence et se branche à la partie des calculs préparatoires.

Cas général:

Si les variables NUMPL1 et NUMPL2 sont différentes c'est que l'on reprend une simulation qui a été interrompue (volontairement ou non). Le fichier de sauvegarde qui doit être lu est celui correspondant au numéro de ligne le plus faible, car l'interruption a pu avoir lieu pendant l'écriture du fichier le plus récent.

Après lecture du fichier de sauvegarde le programme se poursuit normalement par le calcul d'une ligne d'image dont le résultat est aussitôt écrit dans le fichier image. ADELE écrit ensuite les variables à sauvegarder dans le fichier de sauvegarde adéquat ainsi que le numéro de la ligne d'image dans le fichier d'aiguillage correspondant.

Puis le programme passe au calcul de la ligne suivante.

La liste des données qui doivent être fournies au programme de simulation, ainsi que leur signification, se trouve dans l'annexe 6. Un listing des programmes est fourni dans la dernière annexe.

C./-VISUALISATION DES IMAGES

1.-IMPORTANCE DE LA VISUALISATION:

Les programmes de simulation fournissent les intensités reçues en chaque point de la plaque photographique. L'expérience donne une image des défauts sur une plaque photographique réelle (plaque nucléaire Ilford L4). On ne peut donc pas comparer directement le résultat du calcul avec l'expérience, puisque le noircissement d'une plaque n'est pas proportionnel à l'intensité reçue.

Différents facteurs entrent en jeu lors de l'obtention des images expérimentales. Epelboin et Lifchitz (1974) ont montré, en effectuant des topographies sur un même cristal avec des temps de pose différents, que l'image d'une dislocation variait énormément suivant ces temps de poses. Ce fait doit être pris en compte dès que l'on ne se contente plus d'une étude qualitative, mais que l'on désire tirer de la photographie expérimentale des informations quantitatives. (Par exemple mesurer la largeur de l'image dynamique d'une dislocation, puis comparer avec la simulation).

Les conditions de développement de la plaque photographique peuvent aussi modifier les images obtenues. Certaines conditions, comme les températures des bains, sont contrôlables et reproductibles, alors que d'autres, comme l'usure de ces mêmes bains, peuvent varier d'une fois à l'autre.

On comprend donc que lors de la transformation des intensités calculées en densité de gris pour comparaison avec l'expérience, il faudrait pouvoir tenir compte de tous ces facteurs qui ne sont pas toujours bien connus.

2.-DIFFERENTES METHODES EMPLOYEES:

La première image de dislocation simulée par Balibar et Authier (1967) fut représentée en remplissant à la main l'espace entre des courbes de niveaux à l'aide de gris de densités variables. Ce procédé, qui avait l'inconvénient d'être extrêmement long, subjectif et peu reproductible, ne donnait que des images grossières (figure 46).

Epelboin et Lifchitz (1974) utilisèrent une imprimante pour représenter des simulations de sections. Ils mirent au point, pour le cas des topographies aux rayons X, une échelle de gris dont chaque niveau était obtenu par superposition de caractères. L'avantage de cette méthode de représentation est qu'elle peut être utilisée dans tous les centres de calcul et qu'elle donne des résultats rapides et assez reproductibles. Par contre les images obtenues sont de qualité médiocre à cause de l'espacement entre les caractères et du nombre limité de niveaux de gris (une vingtaine). La figure 47 en donne un exemple.

L'utilisation de plus en plus répandue d'écrans graphiques,

tels que par exemple Tektronix, a permis à Epelboin (1978) de mettre au point un nouveau programme de visualisation d'images. Avec ce programme (PHOT5) chaque niveau de gris est obtenu en contrôlant la durée d'irradiation de l'écran par le spot électronique, ce qui donne des points plus ou moins gros. Nous avons utilisé PHOT5 pendant la première année de notre travail. Comme le montre la figure 48, les images obtenues sont de bonne qualité.

Lors de leur étude des émulsions nucléaires utilisées en topographie aux rayons X, Epelboin, Jeanne-Michaud et Zarka (1979) ont déterminé la courbe de réponse des plaques Ilford L4 qui donne la densité de gris D en fonction de l'illumination E. L'illumination E est le produit de l'intensité I par le temps d'exposition t. Cette courbe de réponse est représentée sur la figure 49. Pour simplifier PHOT5 utilise en fait la courbe en pointillé qui est caractérisée par sa position et sa pente γ . Afin d'obtenir une image correspondant à la topographie il est nécessaire d'essayer un grand nombre de positions de la courbe. Or le temps d'affichage d'une grosse image peut être de l'ordre de 10 minutes. En conséquence cette méthode de visualisation ne possède pas l'interactivité souhaitable pour régler les différents paramètres intervenant dans la transformation des intensités calculées.

3.-VISUALISATION SUR PERICOLOR 2000:

L'arrivée au centre de calcul d'un Péricolor 2000 a fait progresser considérablement la méthode de représentation des images simulées. Le PC2000 est un système de visualisation et de traitement d'images 512x512, aussi bien en noir et blanc qu'en couleur. La connexion avec le mini ordinateur permet d'envoyer sur le PC2000 une image stockée sur disque en quelques secondes. Après affichage de l'image l'utilisateur a à sa disposition un grand nombre de courbes de réponses et de fonctions qui lui permettent de traiter cette image en temps réel.

Nous avons écrit un programme (VISUAL) qui transforme les intensités calculées par ADELE en niveaux de gris et envoie l'image ainsi formée au PC2000.

Epelboin (1976) a fait remarquer que faire varier le temps d'exposition revenait à translater horizontalement la courbe en pointillé de la figure 49 d'une longueur égale à $\text{Log}(t)$. Or le PC2000 permet justement d'utiliser une courbe de réponse analogue dont on peut faire varier la pente et que l'on peut translater.

Nous nous contentons donc dans le programme VISUAL de normaliser le logarithme des intensités calculées sur 256 niveaux de gris IZ comme indiqué sur la figure 50. Ceci se fait à l'aide de la formule :

$$IZ = DT * [\text{Log}(I_{\text{max}}) - \text{Log}(I)] \quad (48)$$

avec: $DT = \frac{255}{\text{Log}(i_{\text{max}}) - \text{Log}(i_{\text{min}})}$

I_{max} et I_{min} étant les valeurs maximales et minimales des intensités calculées. Avec cette méthode on ne perd aucune information lors de la transformation intensité niveau de gris, et on rejette volontairement tous les traitements à effectuer sur l'image dans le PC2000.

Une fois l'image normalisée et envoyée sur le PC2000, l'utilisateur peut à l'aide d'une boule roulante modifier en temps réel la courbe de réponse de l'affichage afin d'obtenir une image la plus proche possible de la topographie: il simule ainsi les conditions expérimentales de prise de vue. Il peut de plus faire ressortir certains détails de l'image étudiée en utilisant une représentation en fausses couleurs.

La figure 21 montre la très bonne qualité des images visualisées sur le Péricolor 2000.

- CHAPITRE 4 -

EXEMPLES D'APPLICATIONS:

A./-Dislocations dans le Silicium.

- 1.-Dislocation très inclinée
- 2.-Dislocation faiblement inclinée

B./-Autres exemples de simulations.

- 1.-Dislocations dans KDP avec $\vec{h} \cdot \vec{b} = 0$
- 2.-Dislocations dans Ga-As en rayonnement blanc

C./-Paquets de dislocations et canaux.

- 1.-Paquet de dislocations dans le Formiate de Lithium
- 2.-Canaux dans le Béryl
- 3.-Conclusion

D./-Simulations de sections.

- 1.-Programme DEFVAP
- 2.-Programme SLIT

Les premières simulations de translations ont permis de tester le programme ADELE, afin de vérifier que les images calculées pour des dislocations dont on connaissait bien les caractéristiques étaient en bon accord avec les images expérimentales, et pour essayer les différentes options disponibles. Pour ces vérifications on a choisi deux dislocations dans des cristaux de Silicium: la première est une dislocation très inclinée dont l'image en topographie présente de nombreux détails; le contraste de la deuxième dislocation est au contraire pauvre car elle est peu inclinée dans le cristal.

D'autres exemples de simulations de translations sont présentés dans le paragraphe B: dans KDP un cas pour lequel le produit du vecteur réflexion par le vecteur de Burgers est nul, ce qui donne des images de faible contraste; dans Ga-As où l'on a tenté de comparer des translations avec des topographies effectuées en rayonnement synchrotron blanc.

Le programme de translations a aussi été utilisé pour simuler des images de paquets de dislocations ainsi que de canaux. Pour ce type de défauts les simulations de sections ne peuvent être employées: la zone déformée étant très grande, on n'observerait qu'une image noire. Les topographies en translation sont donc dans ce cas très utiles. Une étude de la forme des images directes observées et calculées a été réalisée, et on a comparé ces images avec celles prévues à l'aide des critères d'Authier et de Balibar.

Les simulations de translations ont eu des conséquences sur le calcul des topographies en pose fixe: deux nouveaux programmes utilisant le processeur vectoriel ont été écrits et permettent des simulations d'images plus rapides.

A./-DISLOCATIONS DANS LE SILICIUM

1.-DISLOCATION TRES INCLINEE:

Le premier test du programme a été effectué sur la dislocation qui nous a servi d'exemple au paragraphe C du chapitre 1, et dont la topographie en translation due à Authier est représentée sur la figure 12. Il s'agit d'un cristal de Silicium de 800 microns d'épaisseur dont les faces sont des plans $(1\bar{1}\bar{1})$. La réflexion choisie est $\bar{2}20$ avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$. On est donc dans le cas d'une réflexion symétrique avec un angle de Bragg de 10.667 degrés. La dislocation de vecteur de Burgers $1/2[10\bar{1}]$ traverse le cristal de part en part en faisant un angle d'environ 65 degrés par rapport aux faces (figure 51). On constate sur la topographie expérimentale (figure 12) que cette dislocation est quasiment rectiligne, et ses coordonnées dans le repère utilisateur sont environ $(-0.3, 1.0, 2.11)$.

Il a fallu simuler une image de grandes dimensions: 400 microns de haut sur un peu moins de 330 microns de large. La première image, qui a été faite avec une résolution de 0.8 micron et en ne calculant qu'une ligne sur trois, est représentée sur la figure 52. C'est la plus grosse simulation que nous ayons faite et elle a demandé environ 61 heures de calcul. L'accord avec la topographie de la figure 12 est très satisfaisant: on retrouve toute la série des franges de l'image intermédiaire, très grandes en bas de la photographie là où la dislocation est proche de la face d'entrée, et qui vont en diminuant vers le haut, à mesure que la ligne de la dislocation se rapproche de la face de sortie du cristal. A droite de ces franges, l'image directe se présente comme une ligne noire très visible du côté de la face de sortie, comme sur l'image expérimentale. Cette image directe se dédouble et s'atténue au milieu de la simulation, sans que la résolution de la plaque expérimentale ni les profils effectués au densitomètre nous permettent de confirmer ou d'infirmer ce fait. On observe aussi des franges très blanches et rapprochées en haut de la photographie simulée qui correspondent bien à une zone très claire de la topographie.

La principale différence entre les figures 12 et 52 réside dans la présence d'une série de franges, formant la partie gauche de l'image intermédiaire sur la simulation, non visibles sur l'expérience.

Nous pensons que cette différence vient de deux faits:

-La résolution de la topographie n'est pas aussi bonne que celle de l'image simulée: les plaques nucléaires employées ont une résolution théorique de 1 micron, mais dans la pratique elle est plutôt de l'ordre de 3 microns.

-Le "bruit de fond" dû aux grains de la plaque noie les franges dont le contraste est assez faible.

On remarquera que ces franges semblent en opposition de phase par rapport à celles situées à droite près de l'image directe. Ce fait a parfois été observé sur des topographies expérimentales.

Un point très important dans l'interprétation des images de dislocations est la détermination du vecteur de Burgers. Dans le cas où l'interprétation des sections est impossible (cristal mince) les translations sont le seul moyen disponible pour identifier \vec{b} .

C'est pourquoi nous avons refait la même simulation mais en inversant le sens du vecteur de Burgers (figure 53). L'allure générale de l'image est la même, mais on constate maintenant la présence de franges noires dans l'image intermédiaire à la place de franges blanches sur la figure 52, ce qui ne correspond pas à l'image expérimentale. On remarquera aussi juste de part et d'autre du point d'émergence de la dislocation que les deux taches blanche et noire ont subi elles aussi une inversion de contraste.

Cette deuxième simulation confirme les résultats obtenus antérieurement, selon lesquels le contraste de certaines franges de l'image intermédiaire s'inverse avec le vecteur de Burgers. Elle prouve aussi que, dans le cas d'une dislocation suffisamment inclinée dans le cristal, cette image permet de déterminer le signe du vecteur de Burgers en comparant la topographie en translation avec diverses images calculées.

Il était intéressant de tester avec cette dislocation les options du programme permettant de diminuer la résolution afin de gagner du temps de calcul, car son image présente des détails fins: on était donc dans un cas défavorable puisqu'une diminution de la résolution risquait de faire disparaître ces détails.

La figure 54 présente une simulation de la même dislocation réalisée avec une résolution de 1.6 microns, et en ne calculant qu'une ligne d'image sur trois. L'image obtenue reste de bonne qualité et présente le grand avantage d'avoir demandé 15h20mn de calcul au lieu de 61h.

Par contre sur la simulation de la figure 55, qui n'a nécessité que 6h10 de calcul pour une résolution de 2.4 microns, on constate que les franges de gauche de l'image intermédiaire ne sont plus correctes: elles semblent se relever à leur extrémité au lieu de s'abaisser. Ceci est dû au fait que la distance entre les plans calculés (7.2 microns) est trop grande et devient de l'ordre de grandeur de l'interfrange; il manque ainsi des morceaux de franges, ce qui conduit à des résultats erronés lors de l'interpolation.

Afin d'éviter cet inconvénient on peut calculer une ligne d'image sur deux toujours avec la résolution de 2.4 microns, ce qui permet d'obtenir l'image satisfaisante de la figure 56 en 11h25mn de calcul.

Pour réaliser une caractérisation rapide du défaut sans s'attacher aux détails fins de l'image, on peut même utiliser l'option qui donne 3.2 microns de résolution, à condition toutefois de calculer au moins une ligne sur deux. Les simulations des figures 57 et 58 faites en 5h12mn seulement, et avec des vecteurs de Burgers opposés, montrent qu'il est toujours possible d'identifier le vecteur de Burgers de la dislocation réelle (figure 12) comme étant celui de la simulation de la figure 57 c'est-à-dire $1/2[10\bar{1}]$.

Ces premières simulations ainsi que d'autres effectuées ultérieurement ont permis de dresser le tableau suivant (les rapports de temps de calcul ne sont qu'indicatifs):

IMP	KPERF	Résolution en micron	Distance entre plans calculés	Rapport des temps de calcul	
1	1	0.8	0.8	48	} Excellents résultats mais temps de calcul très longs
1	2	1.6	1.6	12	
1	3	2.4	2.4	16/3	Très bon résultat: à utiliser dans le cas où l'on a besoin d'une image de très grande qualité
1	4	3.2	3.2	3	Très bon résultat: option recommandée
2	1	0.8	1.6	24	Excellent résultat mais temps de calcul très long
2	2	1.6	3.2	6	Très bon résultat calcul un peu long
2	3	2.4	4.8	8/3	Option recommandée: le meilleur compromis qualité-temps de calcul
2	4	3.2	6.4	3/2	Bon résultat sauf si les contrastes varient vite
3	1	0.8	2.4	16	Très bon résultat mais temps de calcul très long
3	2	1.6	4.8	4	Option recommandée: bon compromis qualité-temps de calcul
3	3	2.4	7.2	16/9	Résultat correct sauf si les contrastes varient vite
3	4	3.2	9.6	1	A éviter: distance entre les plans calculés trop grande

2.-DISLOCATION FAIBLEMENT INCLINEE:

La topographie de la figure 59 a été réalisée par Lefeld Sosnowska sur un cristal de Silicium de 440 microns d'épaisseur. On observe en son milieu une série de six dislocations courbes traversant le cristal. Leur image se limite à un contraste noir blanc. La réflexion utilisée est $33\bar{3}$ avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$. Comme

la normale à la face d'entrée est $[112]$ c'est une réflexion symétrique, et l'angle de Bragg vaut 19.84° .

Le schéma de la figure 60 montre que les dislocations sont parallèles à la direction $[10\bar{1}]$ du côté de la face d'entrée du cristal, et tendent vers la direction $[2\bar{1}\bar{1}]$ du côté de la face de sortie.

Nous avons choisi de simuler l'image de la dislocation située en haut sur la topographie car c'est celle qui est la plus rectiligne.

Les deux simulations réalisées avec des vecteurs de Burgers égaux à $1/2[01\bar{1}]$ et $1/2[0\bar{1}\bar{1}]$ sont représentées sur les figures 61 et 62 respectivement. La largeur totale de ces images est d'environ 1500 microns et leur calcul a demandé 22 heures pour une résolution de 2.4 microns.

Du fait de la faible inclinaison de la ligne de la dislocation dans le cristal (environ 17°), l'image intermédiaire est quasiment inexistante: on n'observe que l'image directe sous la forme d'une ligne noire épaisse bordée de l'image dynamique blanche. Les deux simulations sont en bon accord avec la topographie de la figure 59, et l'inversion du vecteur de Burgers ne permet pas d'observer de changement sensible sur les images simulées. Il n'est pas possible de lever l'indétermination sur le sens de ce vecteur à cause du manque d'informations présentes sur cette topographie.

Cet exemple d'application montre la nécessité d'une information suffisante sur les topographies pour pouvoir réaliser une étude à l'aide de simulations de translations. Un travail commencé sur des dislocations parallèles aux faces d'une lame de Quartz a ainsi été abandonné car:

- la pauvreté des images recueillies expérimentalement ne permettait que difficilement de caractériser les défauts observés;
- les topographies avaient été réalisées dans des conditions variant énormément d'une réflexion à l'autre. Comme les plaques n'étaient plus disponibles il n'a pas été possible de réaliser les densitométries indispensables pour ajuster le contraste des images simulées à celui des images réelles.

B./-AUTRES EXEMPLES DE SIMULATIONS

1.-DISLOCATIONS DANS KDP AVEC $\vec{H} \cdot \vec{b} = 0$:

Dunia, Malgrange et Petroff (1980) ont étudié des dislocations dans un cristal de KDP (Phosphate Dihydrogéné de Potassium) de 1100 microns d'épaisseur. Ils ont pu déterminer le signe des vecteurs de Burgers de ces dislocations en interprétant le contraste des topographies réalisées pour la réflexion 020 pour laquelle le produit $\vec{h} \cdot \vec{b}$ est nul. Ce contraste provient en effet des déformations dues à la relaxation des contraintes en surface, et peut être

expliqué par la théorie dynamique, dans ce cas particulier de dislocations quasi vis et presque perpendiculaires aux faces du cristal.

Les simulations réalisées pour cette réflexion, avec le programme ADELE qui ne prend pas en compte les relaxations des contraintes en surface, donnent des images presque uniformes avec un contraste négligeable, ce qui confirme l'interprétation de Dunia et al.

Une autre topographie réalisée pour la réflexion 200 avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$ est représentée sur la figure 63. Le contraste assez faible des deux dislocations présentées ici peut être expliqué par le fait que le produit $\vec{h} \cdot \vec{b}$ est nul. La géométrie de ces dislocations de vecteur de Burgers opposés dont nous avons simulé les images est représentée sur la figure 64. Les lignes font environ 20 degrés avec la normale au cristal et comme les vecteurs de Burgers sont suivant cette normale, les dislocations ont une composante vis très importante.

Les simulations des figures 65 et 66 ont été calculées avec une résolution de 1.6 micron: elles représentent une zone de 500 microns de haut sur environ 240 microns de large, et ont demandé 11h30mn de calcul chacune. Elles sont en bon accord avec l'expérience et permettent d'affirmer que la dislocation située à gauche sur la topographie de la figure 63 correspond à la simulation de la figure 65, alors que celle de droite est identique à la simulation de la figure 66. La représentation de ces images a été faite sur écran Tektronix, ce qui explique leur qualité moyenne. L'intensité du fond est trop élevée. Pour obtenir une représentation meilleure il aurait fallu afficher cette image un grand nombre de fois, en faisant varier les paramètres de la courbe de réponse simulée (voir chapitre 3-C-2): ceci aurait demandé un temps trop long.

On note sur les photographies calculées la présence d'une fine image directe à droite des franges, plus intense du côté de la face de sortie. Cette image n'est pas visible sur la topographie. Cette absence peut être due soit à la résolution insuffisante de la plaque expérimentale, soit à un phénomène de relaxation au niveau du coeur des dislocations.

2.-DISLOCATIONS DANS GA-AS EN RAYONNEMENT BLANC:

Pendant la fabrication d'hétérojonctions par épitaxie d'une couche $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ sur un substrat de Ga-As vers 850 degrés, on a souvent apparition de dislocations (misfit dislocations) lors du retour à la température ambiante, à cause des différences de paramètres cristallins entre la couche épitaxiée et le substrat.

Petroff et Sauvage (1978) ont étudié ces dislocations dans le cas d'un cristal de 316 microns d'épaisseur et d'une couche épitaxiée de 1.3 micron. L'interface est un plan (001) et les lignes des dislocations sont parallèles à la direction [110]. Les différents vecteurs de Burgers possibles sont indiqués sur la figure 67. Sur la topographie de la figure 68 réalisée avec la réflexion assymétrique

$\bar{4}\bar{2}\bar{2}$, les dislocations dont le vecteur de Burgers a été identifié sont indiquées par des flèches.

Nous avons effectué une série de simulations en remplaçant la couche épitaxiée par une même épaisseur de Ga-As. Les images calculées, ainsi que des coupes perpendiculaires aux lignes des dislocations sont représentées sur les figures 69 à 73.

La coupe calculée pour la dislocation de vecteur de Burgers \bar{b}_1 (figure 70) correspond parfaitement à la topographie.

La figure 71 montre que le contraste de la dislocation de vecteur de Burgers \bar{b}_1' est beaucoup plus faible ce qui concorde bien avec l'expérience; cependant d'après la courbe l'image de cette dislocation devrait être blanche, or elle semble noire sur la figure 68.

Pour la dislocation coin le profil de la figure 72 est en bon accord avec la topographie, bien que sur cette dernière l'image dynamique semble un peu plus large.

On a par contre un désaccord total entre la simulation d'image de la dislocation de vecteur de Burgers \bar{b}_2 (figures 69 et 73) et la topographie qui présente un double contraste.

Lors de la comparaison entre images ou profils simulés et images expérimentales, on doit avoir à l'esprit que:

- Les dislocations parallèles aux faces du cristal sont situées à seulement 1.3 micron de la face de sortie. Comme les pas de calcul ne sont guère plus faibles, on a un seul noeud du réseau entre le coeur de la dislocation et la face de sortie du cristal: les phénomènes se produisant dans cette zone sont mal pris en compte.

- Dans le calcul la couche épitaxiée est remplacée par une couche de même épaisseur de Ga-As (en particulier on utilise les X_{As} de Ga-As).

- Le calcul des déformations est fait en milieu infini, c'est-à-dire que l'on ne prend pas en compte l'influence de la surface de sortie qui est pourtant très proche. Riglet (1979) a montré dans le cas des topographies en réflexion que les relaxations en surface pouvaient modifier fortement les contrastes. Dans le cas de Laue on peut penser que cet effet est moindre, mais il n'en reste pas moins présent.

- L'expérience a été réalisée en rayonnement synchrotron à LURE en faisceau blanc, alors que les simulations sont faites pour un rayonnement monochromatique.

D'un point de vue théorique l'intensité intégrée en topographie en rayonnement synchrotron blanc est différente de celle d'une topographie en translation. Comme nous l'avons vu au chapitre 2 (paragraphe B-1) cette dernière est donnée par l'intégrale (46) où $\Delta\theta_{\text{max}}$ tend vers l'infini.

Dans l'expérience synchrotron le faisceau incident présente une divergence très faible, mais une étendue spectrale grande. En conséquence l'intégration angulaire est très limitée ($\Delta\theta_{\text{max}}$ petit) mais on doit en plus effectuer une intégration spectrale.

Si on se place loin d'une arête d'absorption pour que les constantes diélectriques du cristal varient lentement avec la longueur d'onde, on peut en première approximation supposer que la divergence spectrale compense grossièrement le manque de divergence

angulaire: localement dans une zone déformée du cristal, des rayons X qui seraient diffractés dans le cas d'une translation ne le sont plus du fait de la faible divergence angulaire du faisceau, mais sont "remplacés" par d'autres de longueur d'onde différente.

Cette explication qualitative n'est évidemment pas une démonstration et demanderait des approfondissements théoriques. Cependant elle est justifiée du point de vue expérimental par la faible différence d'aspect des deux types d'images.

Dans le cas particulier étudié ici, la topographie en faisceau blanc a malheureusement été réalisée assez près de la discontinuité K d'absorption du Ga (1.19 Å), ce qui fait que l'approximation précédente n'est pas entièrement justifiée.

Ces faits peuvent expliquer certaines différences entre images calculées et images réelles ainsi que le désaccord dans le cas de la dislocation de vecteur de Burgers b_2 .

Pour la réflexion $\bar{2}20$ on a vérifié en simulant l'image de la dislocation coin que son contraste s'éteint totalement comme sur la topographie expérimentale.

C./-PAQUETS DE DISLOCATIONS ET CANAUX

1.-PAQUET DE DISLOCATIONS DANS LE FORMIATE DE LITHIUM:

Le cas des paquets de dislocations est un exemple typique pour lequel les translations présentent un grand intérêt: le volume de la zone fortement déformée est si important que les sections ne donneraient qu'une énorme image directe noire inutilisable.

Epelboin et Ribet (1974) ont appliqué le critère de la dérivée première (37) introduit par Authier, au cas d'un paquet de dislocations dans un cristal de Formiate de Lithium ($\text{LiHCO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$). Ce critère permet de prévoir la forme de l'image directe d'un défaut si on suppose que cette image est principalement due à la réflexion cinématique des rayons X par la zone très déformée du cristal.

Pour le calcul des déformations, le paquet de dislocations est remplacé par une dislocation unique ayant un vecteur de Burgers égal à la somme des vecteurs de Burgers des dislocations formant le paquet.

Le cristal orthorhombique étudié, coupé perpendiculairement à la direction [001], possède une épaisseur de 1200 microns, et les dislocations sont normales aux faces. Les topographies en translation effectuées par Ribet pour les réflexions symétriques 200 et $1\bar{1}0$, sont représentées sur les figures 74 et 75. On constate que, du fait de la géométrie particulière, le paquet de dislocations se présente sous la forme d'une grosse image directe noire formée de quatre lobes.

Des observations au microscope optique, ainsi que

l'application des règles d'extinction usuelles aux topographies obtenues pour différentes réflexions, n'ont pas permis de déterminer le nombre des dislocations formant le paquet, ni leur vecteur de Burgers.

Epelboin a alors réalisé un programme qui calcule la zone située autour du coeur de la dislocation dans laquelle le critère (37) est vérifié. La forme de cette zone, calculée pour différents vecteurs de Burgers, est ensuite comparée à celle de l'image directe expérimentale. Ces comparaisons ont permis à Epelboin et Ribet de conclure que le paquet semblait formé d'environ 50 dislocations dont 30 de vecteur de Burgers $(\vec{a}+\vec{b}-3\vec{c})$ et 20 de vecteur de Burgers \vec{a} .

Nous avons représenté ces résultats sous forme de courbes de niveaux sur écran graphique et table traçante Benson. Les figures 76 et 77 montrent les zones de l'image directe prévues pour les réflexions 200 et $1\bar{1}0$ respectivement. On peut noter de légères différences avec les images expérimentales des figures 74 et 75: les lobes latéraux sont plus larges sur la topographie obtenue pour la réflexion 200; pour la réflexion $1\bar{1}0$ l'image prévue comporte six lobes au lieu de quatre sur la figure 75. Globalement la forme et l'orientation des zones calculées sont en assez bon accord avec les images expérimentales. Pour d'autres réflexions non présentées ici cet accord est cependant moins bon.

Avant de réaliser des simulations de translations, nous avons en partie repris l'étude d'Epelboin et Ribet. Cela nous a permis de constater que la forme de l'image directe calculée d'après le critère de la dérivée première (37) dépend de l'orientation du vecteur de Burgers global du paquet, alors que la taille de cette image dépend de sa norme. Ceci s'explique par le fait que le terme $\partial(\vec{h} \cdot \vec{u}) / \partial Sh$ est une fonction linéaire des composantes du vecteur de Burgers. Il est donc normal que la forme des zones qui correspondent à l'image directe ne subisse qu'une simple homothétie lorsqu'on augmente la norme de ce vecteur sans changer son orientation.

Nous avons vérifié que le résultat obtenu par Epelboin et Ribet, suivant lequel trois cinquième des dislocations ont un vecteur de Burgers égal à $(\vec{a}+\vec{b}-3\vec{c})$ et deux cinquième égal à \vec{a} , est celui qui fournit des zones dont les formes sont les plus proches de l'expérience. Par contre il nous semble, d'après la taille des zones calculées à l'aide du critère (37), que le nombre des dislocations a été sous estimé: il serait environ six fois plus élevé que celui déterminé par Epelboin et Ribet.

Des simulations de translations ont été effectuées afin d'étudier les rapports entre images expérimentales, images calculées et images prévues par le critère de la dérivée première d'Authier.

Des images de 400×600 microns ont été calculées avec le programme ADELE pour la résolution de 2.4 microns. Elles sont représentées sur les figures 78 et 79, et ont demandé 3h30mn et 2h30mn de calcul. De même que les topographies expérimentales elles sont formées principalement d'une grosse image directe intense, ce qui est normal puisque les lignes des dislocations sont perpendiculaires aux faces du cristal. Pour la réflexion 200 on observe la présence d'une légère image dynamique sur la gauche

(figure 78). Cependant la forme de ces images simulées ne correspond ni à celle prévue par le critère de la dérivée première, ni à celle observée sur les topographies.

Nous avons tenté d'appliquer au phénomène de formation des images directes le critère de l'optique géométrique (34) introduit par Balibar. Ce critère indique que lorsque la dérivée seconde du produit scalaire $\vec{h} \cdot \vec{u}$ n'est plus négligeable devant le terme de droite de l'inégalité (34) il se produit un phénomène de diffraction des champs d'ondes. Balibar, Epelboin et Malgrange (1975) ont montré par des expériences simulées sur ordinateur et dans le cas d'une déformation due à un fort gradient thermique que ce phénomène devient rapidement prédominant lorsque l'on augmente le gradient. D'un point de vue théorique Balibar et al. (1983) ont démontré récemment l'existence de la diffraction ou phénomène de recréation de champs d'ondes, dans le cas d'un gradient de déformation constant.

Epelboin (1979) a vérifié que la diffraction était prépondérante dans la formation de l'image directe d'une dislocation. Il était donc logique d'essayer de comparer la forme des zones définit par

$$\left| \frac{\partial^2 [\vec{h} \cdot \vec{u}(x)]}{\partial s_0 \partial s_k} \right| > \frac{\pi \gamma_0 \gamma_k}{2 \Lambda_p^2} \quad (49)$$

à celle de l'image directe observée sur les simulations.

Dans le volume du cristal l'inégalité (49) définit autour de la ligne de la dislocation un cylindre dans lequel on suppose que prennent naissance les faisceaux diffractés qui donnent l'image directe. La coupe de ce cylindre par un plan perpendiculaire au paquet de dislocations, donc parallèle aux faces du cristal, est représentée sur les figures 80 et 81 dans le cas des réflexions 200 et 110. La forme des zones limitées par ces courbes correspond exactement aux images directes des simulations des figures 78 et 79. Pour adapter la taille de ces zones à celle des images simulées nous avons dû multiplier le terme de droite de l'inégalité (49) par un coefficient égal à 0.2.

Une correspondance aussi parfaite est surprenante. Nous pensions que sur les simulations on observerait la projection du cylindre suivant la direction réfléchie (figure 82), c'est à dire l'intégration du domaine contenu dans les courbes de niveaux des figures 80 et 81 selon une translation horizontale égale à la projection AC de la ligne de la dislocation sur la plaque photographique. (AC = 103 microns pour la réflexion 200).

Or il n'en est rien: l'image directe observée sur les simulations est centrée au point B de la figure 82, c'est à dire que tout se passe comme si elle se formait à une certaine profondeur z de l'ordre de 700 à 800 microns pour la réflexion 200 et d'environ 800 à 900 microns pour la réflexion 110.

2.-CANAUX DANS LE BERYL:

Nous avons réalisé une étude similaire au travail effectué pour les paquets de dislocations dans le formiate de Lithium dans un cristal de nature différente afin de voir si nous retrouvions des résultats analogues.

Des images de canaux vus en topographie aux rayons X en translation ont été étudiées par Scandale et Zarka (1982) dans le cas d'une lame basale d'un cristal de Béryl de 1400 microns d'épaisseur. Au cours de cette étude ils ont montré que l'origine de ces canaux était très probablement due à une dissolution post-croissance du cristal s'effectuant préférentiellement dans les régions très déformées autour de paquets de dislocations.

La figure 83 présente une topographie effectuée par Zarka sur ce cristal de Béryl pour la réflexion symétrique $\bar{1}10$ avec le rayonnement $K\alpha$ du Molybdène. On y observe un grand nombre de canaux qui sont orientés perpendiculairement à la lame, c'est à dire suivant la direction $[001]$. Le contraste de ces canaux est assez semblable à ceux que nous avons vu pour le Formiate de Lithium et serait du aux déformations "rémanentes" des paquets de dislocations préexistantes qui ont subi la dissolution.

Scandale et Zarka ont utilisé le programme de calcul d'image directe d'Epelboin afin de déterminer un nombre de dislocations "équivalentes" et un vecteur de Burgers "équivalent" aux canaux. Pour le contraste indiqué par une flèche sur la figure 83 ils ont conclu que le canal correspondant était "équivalent" à 50 dislocations de vecteur de Burgers moyen $(2a+3b)$.

L'image directe prévue par le critère de la dérivée première est tracée sur la figure 84; son allure générale correspond assez bien à celle du contraste observé sur la topographie, bien qu'elle présente des petits lobes supplémentaires. Comme dans le cas du paquet de dislocations étudié au paragraphe 1, nous avons constaté en calculant des images directes pour différents canaux et différentes réflexions, que les résultats concordaient plus ou moins bien avec les images expérimentales.

Une première simulation de translation de 200×200 microns a été calculée avec une résolution de 1.6 micron pour le vecteur de Burgers global $(100\vec{a}+150\vec{b})$. L'image obtenue sur la figure 85 ne correspond ni à l'image expérimentale ni à la courbe de la figure 84.

Le critère de la dérivée seconde a permis de tracer l'intersection du cylindre défini par l'inégalité (49) avec un plan perpendiculaire au canal. Si on multiplie le terme de droite de cette inégalité par un coefficient de 0.3 on obtient la courbe de la figure 86 qui est en bon accord avec la simulation (figure 85).

On observe cependant de nouveau que l'on n'a pas d'intégration du domaine défini par cette courbe le long de la projection AC de la ligne de la dislocation (figure 82): AC = 60 microns dans ce cas. Tout ce passe comme si l'image directe simulée provenait de la portion du cylindre proche du milieu du cristal.

Nous avons aussi effectué des simulations en faisant varier

uniquement le module du vecteur de Burgers global. Dans ce cas seule la taille de l'image directe prévue par le critère d'Authier (37) change, alors que sa forme reste constante. Ce résultat est aussi vrai pour l'image prévue à l'aide du critère de Balibar (49).

Les simulations calculées avec des vecteurs de Burgers $(200\vec{a}+300\vec{b})$, $(20\vec{a}+30\vec{b})$ et $(50\vec{a}+75\vec{b})$ sont représentées sur les figures 87, 88 et 89 respectivement. Elles permettent de constater que la forme de l'image simulée ne reste pas constante avec la variation du vecteur de Burgers global. Pour les grands vecteurs de Burgers (figures 85 et 87) on a un bon accord avec l'image directe prévue à l'aide du critère de la dérivée seconde (figure 86). A mesure que le vecteur de Burgers diminue cet accord devient de moins en moins bon (figure 89 et 88).

Pour confirmer ce résultat nous avons repris le cas du paquet de dislocations dans le Formiate de Lithium. La nouvelle image calculée avec un "petit" vecteur de Burgers de $(5\vec{a}+3\vec{b}-9\vec{c})$ est représentée sur la figure 90.

Contrairement à la simulation de la figure 78, on n'a plus de correspondance avec l'image directe calculée à l'aide du critère de la dérivée seconde. L'image directe simulée se limite à une ligne noire horizontale épaisse correspondant à la projection, suivant la direction réfléchie, de la ligne de la dislocation sur la plaque photographique.

3.-CONCLUSION:

Les études précédentes portant sur les images de paquets de dislocations dans le Formiate de Lithium et de canaux dans le Béryl, dans le cas particulier où leur orientation est perpendiculaire aux faces du cristal, nous amènent aux constatations suivantes:

- Les images simulées en remplaçant les paquets de dislocations ou les canaux par une dislocation unique supposée "équivalente" ne concordent pas avec les images expérimentales observées sur les topographies.

- L'allure générale des images directes prévues à l'aide du critère de la dérivée première (37) d'Authier est en assez bon accord avec les images expérimentales dans un certain nombre de cas. Cependant cet accord n'est pas toujours satisfaisant si on étudie systématiquement les images obtenues pour diverses réflexions.

- La forme de la zone déformée dans laquelle il y a phénomène de diffraction des champs d'ondes d'après le critère de la dérivée seconde de Balibar (49) est identique à celle des images directes des simulations (sans avoir à tenir compte d'une intégration suivant la projection de la ligne de la dislocation). Cette concordance n'est bonne que si le vecteur de Burgers global est grand.

Ces constatations n'ont pas pu être toutes expliquées, mais nous pouvons tout de même avancer les conclusions suivantes:

Le fait que les images simulées ne concordent pas avec les images expérimentales est peut être dû à des phénomènes de relaxation des contraintes en surface qui modifient les images réelles. Le programme de simulation ne prend pas en compte ces phénomènes, et à notre connaissance il n'existe pas de modèle général permettant de calculer dans le cas anisotrope les déformations dues aux relaxations des contraintes.

De plus dans le cas des canaux, il n'est pas certain que le modèle de déformation utilisé soit suffisant: remplacer un canal par une dislocation unique de vecteur de Burgers "équivalent" représente peut être une approximation trop grossière.

Le critère de la dérivée première d'Authier, comme cela a été prouvé par le passé, est valable dans le cas d'une dislocation isolée. Il semble que dans le cas de paquets de dislocations ou de canaux, pour lesquels on a de très fortes déformations et de très grands volumes déformés, ce critère ne donne pas d'aussi bons résultats.

Au contraire le critère de la dérivée seconde de Balibar (49) convient pour ces derniers cas, alors qu'il ne donne pas de résultats corrects pour une dislocation seule. Les images directes prévues par ce critère correspondent d'autant mieux aux images simulées que le vecteur de Burgers est grand: ceci met en évidence un effet de volume. Il faut que le volume déformé atteigne une certaine taille pour que ce critère s'applique.

Ceci est à rapprocher des constatations faites par Epelboin (1975) lors d'une étude sur la propagation des champs d'ondes au voisinage d'une dislocation. La perturbation du trajet des champs ne devenait apparente qu'en dessous du coeur de la dislocation, c'est à dire lorsque ces champs d'ondes avaient parcouru une certaine distance dans la zone déformée.

Le phénomène de formation de l'image directe n'est cependant pas entièrement compris puisque nous n'avons pas pu expliquer pourquoi seule une partie du cylindre défini par l'inégalité (49) semblait agir.

Pour poursuivre cette étude il serait nécessaire de trouver des paquets de dislocations pour lesquels les vecteurs de Burgers soient déterminés expérimentalement sans ambiguïté.

D./-SIMULATIONS DE SECTIONS

La nécessité d'intégrer les équations de Takagi à l'aide d'un processeur vectoriel, pour simuler des images de dislocations en translation en des temps raisonnables, a eu des retombées au niveau du calcul des sections.

Deux nouveaux programmes de simulation de topographies en pose fixe utilisant le FPS100 ont été mis au point.

1.-PROGRAMME DEFVAP:

Le programme DEFVAP est en grande partie similaire au programme de simulation à pas variables DEFV d'Epelboin, et du point de vue de l'utilisateur son emploi est exactement identique. La principale différence est que l'intégration des équations de Takagi sur un triangle de Borrmann est effectuée dans le processeur vectoriel. Cette intégration est reprise du programme de simulation de translation, mais ici on calcule évidemment la propagation des ondes dans tout le triangle de Borrmann.

L'utilisation du FPS100 programmé en langage assembleur donne un gain de temps de calcul considérable: les temps de simulation d'une image en pose fixe sont de l'ordre de 3 à 10 minutes généralement, au lieu d'environ deux heures sur le Mini ordinateur seul, ou 10 à 30 minutes sur IBM 370/168. Ceci permet d'effectuer un grand nombre de simulations en faisant varier les différents paramètres du défaut et en comparant avec les topographies expérimentales, afin d'obtenir le meilleur accord possible.

Le calcul de ces nombreuses images était possible sur les ordinateurs du CIRCE mais il aurait fallu les ramener dans notre centre de calcul puisque la représentation se fait en local. Le transfert des gros fichiers contenant les images aurait demandé une manipulation lourde et longue rendant cette solution peu pratique et pas du tout interactive.

Au contraire la réalisation des simulations en local évite la manipulation des gros fichiers images, et permet de visualiser et étudier une image sur le Péricolor 2000 pendant qu'une autre est en cours de calcul sur le FPS100.

Une étude détaillée de la dislocation présentée sur la figure 60 a été réalisée en collaboration avec Authier, Epelboin et Lefeld-Sosnowska. Un grand nombre de sections ont été calculées pour différentes orientations de la ligne de la dislocation et différentes profondeurs du coeur, ce qui a permis de mettre en évidence l'influence de ces paramètres sur l'image obtenue.

La figure 91 présente un exemple de topographie en pose fixe réalisée par Lefeld Sosnowska avec la réflexion 333. La simulation correspondante de 300x300 microns, calculée par le programme DEFVAP en 3mn20s seulement, est visible sur la figure 92. Comme pour les autres images calculées (non présentées ici), on constate un bon accord systématique entre théorie et expérience. De légères différences peuvent cependant être observées: par exemple seules trois franges de Kato sont visibles sur la section réelle, alors qu'il y en a plus sur les bords de la simulation. Ceci est dû à la largeur de la fente limitant le faisceau incident.

La profondeur de l'intersection de la ligne de la dislocation avec le faisceau direct est de 110 microns sur la simulation; l'incertitude sur la détermination de la profondeur réelle est d'environ ± 10 microns.

2.-PROGRAMME SLIT:

Pour obtenir des images très proches des topographies il est nécessaire de prendre en compte la largeur de la fente limitant le faisceau incident sur le cristal. Comme nous l'avons dit au paragraphe B-2 du chapitre 2, ceci a été réalisé par Epelboin et Authier (1983) en considérant plusieurs points sources indépendants sur la face d'entrée du cristal, au lieu d'un seul pour une simulation de section normale.

La méthode employée initialement consistait à calculer les sections due à chaque point source avec le programme DEFV puis à les ajouter. Ceci demandait un temps de calcul très long et nécessitait le stockage des images à sommer.

Le programme SLIT pour simulation de sections sur processeur vectoriel, avec prise en compte de la largeur de fente, a été écrit en profitant des sous programmes assembleurs déjà mis au point pour les simulations de translations. L'image simulée est en fait une translation partielle, et les temps de calcul sont de l'ordre de 15 à 45 minutes suivant la largeur de fente demandée.

La simulation de la section de la figure 91 a été refaite à l'aide du programme SLIT en prenant une fente de 12 microns, ce qui revient à ajouter cinq sections dont les points sources sur la face d'entrée du cristal sont espacés de 2.4 microns. Le temps de calcul de l'image obtenue sur la figure 93 est d'à peine 15 minutes.

L'influence de la largeur de fente se manifeste globalement par une image plus floue que celle de la figure 92. Mais cette influence est surtout sensible sur deux points:

- l'image directe est plus large que sur la simulation précédente, ce qui est en meilleur accord avec l'expérience.

- sur les bords de la simulation les franges de Kato les plus fines ont disparu et on a un contraste très foncé qui concorde bien avec la topographie de la figure 91.

Le programme SLIT permet donc de pallier aux légères différences que nous avons notées au paragraphe précédent entre topographie et image simulée par DEFVAP.

- CONCLUSION -

Le but de notre travail était de réaliser un programme de simulation d'images de dislocations en topographie aux rayons X en translation. D'un point de vue théorique le calcul pouvait être effectué de trois manières:

1-par addition des intensités dues à des ondes planes d'écart à l'incidence de Bragg variable.

2-par addition des intensités dues à des ondes sphériques dont le point source se déplace (simulation de l'expérience).

3-par sommation des intensités d'une section fictive réalisée en plaçant une source de rayons X au point d'observation (principe du retour inverse de la lumière).

Des travaux antérieurs ont montré que la première méthode était mal adaptée au calcul des translations, et que la seconde lui était supérieure. La précision insuffisante de l'algorithme à pas constants employé à l'époque n'a cependant pas permis de réaliser de simulation.

Grace à un nouvel algorithme à pas variables, nous avons prouvé que les simulations de translations étaient possibles par la méthode 2. Cependant le calcul d'une image était irréalisable dans la pratique car il aurait demandé trop de temps.

La troisième méthode devait permettre de réduire les temps de calcul. Nos tests ont montré que, probablement pour des raisons numériques, l'image directe du défaut était sous estimée et nous avons donc dû calculer les translations en simulant l'expérience.

En ne calculant la propagation des ondes que dans la partie utile des triangles de Borrmann, et en programmant un processeur vectoriel FPS100 directement en langage assembleur nous avons écrit un programme de simulation de translations qui permet des calculs d'images en des temps raisonnables.

Les exemples présentés au chapitre 4 montrent que les images simulées sont en bon accord avec les topographies expérimentales, et permettent de caractériser les dislocations si celles-ci sont suffisamment inclinées dans le cristal.

L'utilisation du programme dans le cas de paquets de dislocations et de canaux n'a pas donné d'aussi bons résultats: les images simulées ne concordent pas avec les images expérimentales sans doute à cause des déformations dues aux relaxations des contraintes en surface. Ceci a cependant permis pour la première fois de mettre en évidence un rapport certain entre l'image directe simulée et celle prévue par le critère de l'optique géométrique de Balibar.

Les temps de calcul restent longs. Ils diminueront dans un avenir proche: les nouveaux processeurs vectoriel sortant sur le marché ou annoncés sont cinq à dix fois plus rapides que celui que nous avons utilisé.

Les efforts futurs devront porter sur trois points:

-En ce qui concerne le calcul des déformations il serait souhaitable de prendre en compte les relaxations des contraintes en surface notamment pour les dislocations proches ou perpendiculaires à la surface. Malheureusement il n'existe pas pour l'instant de modèle général anisotrope permettant un tel calcul, et la programmation dans le processeur vectoriel est longue et délicate.

-La méthode de représentation des images simulées sur la console de visualisation Péricolor 2000 devra être améliorée. Actuellement on utilise une courbe de transformation intensité-niveau de gris fournie par le constructeur, et on ajuste qualitativement "à l'oeil" les paramètres de cette courbe afin d'obtenir une image proche de la topographie. Il faudrait travailler de manière plus rigoureuse: la pente de la courbe de transformation étant fixée une fois pour toutes par la courbe de réponse des plaques expérimentales, on devra imposer pour le fond de l'image (cristal parfait) le niveau dont la densité de gris est égale à celle déterminée par densitométrie de la topographie.

D'autre part il sera peut être nécessaire de tenir compte de la réponse non linéaire de l'écran lui même, et pour la représentation sur photographie de la réponse de la pellicule utilisée.

Tout ceci devra se faire rapidement dans le Péricolor afin de conserver l'interactivité de ce système; on devra donc programmer en assembleur le processeur rapide de cette machine.

-Les programmes de simulation d'images de dislocations, aussi bien en section qu'en translation, sont maintenant des outils de travail précis et donnent des images de qualité. Une comparaison visuelle avec les images expérimentales, telle qu'elle est pratiquée actuellement, n'est pas suffisante pour tirer partie de toutes les informations contenues dans les topographies. Des comparaisons détaillées et quantitatives devront être effectuées: ceci demandera une numérisation la plus fine possible des plaques expérimentales, avec sortie des images numérisées sur Péricolor. Ces images devront certainement subir des traitements (filtrage ou autres) et le processeur vectoriel sera encore à cette occasion un outil précieux.

La possibilité de représentation des intensités en fausses couleurs permettra de faire ressortir certains détails des images simulées, et facilitera la comparaison avec les topographies.

- BIBLIOGRAPHIE -

- ARISTOV.V,KOHN.V,POLOVINKINA.V,SNIGIREV.A -Phys.Stat.Sol.(1982)A72,483
AUTHIER.A - Advance in X-ray analysis (1967) 10, 9 Plenum press N.Y.
AUTHIER.A - Bull. Soc. Franç. Miner. Crist. (1961) 84, 51
AUTHIER.A,MALGRANGE.C,TOURNARIE.M - Acta Cryst. (1968) A24, 126
AUTHIER.A,SIMON.D - Acta Cryst. (1968) A24, 517
AZAROFF et al. - X-ray diffraction (1974) 217 et 295
BALIBAR.F - Thèse de Doctorat ès sciences (1969) Paris
BALIBAR.F,AUTHIER.A - Phys. Stat. Sol. (1967) 21, 413
BALIBAR.F,CHUKHOVSKII.F.N,MALGRANGE.C - Acta Cryst. (1983) A39,387
BALIBAR.F,EPELBOIN.Y,MALGRANGE.C - Acta Cryst. (1975) A31, 836
DARWIN.C.G - Philos. Mag. (1914) 27, 315
DUNIA.E,MALGRANGE.C,PETROFF.J.F - Phil. Mag. (1980) A41, 291
EPELBOIN.Y - Acta Cryst. (1975) A31, 591
EPELBOIN.Y - Acta Cryst. (1977) A33, 758
EPELBOIN.Y - Acta Cryst. (1979) A35, 38
EPELBOIN.Y - Acta Cryst. (1981) A37, 132
EPELBOIN.Y - Acta Cryst. (1983) A39, 761
EPELBOIN.Y - J. Appl. Cryst. (1974) 7, 372
EPELBOIN.Y - J. Appl. Cryst. (1976) 9, 355
EPELBOIN.Y - J. Appl. Cryst. (1978) 11, 675
EPELBOIN.Y - Simulation of section topographs (1980) notice de DEFV
EPELBOIN.Y - Thèse de Doctorat d'état (1974) Chapitre 2 et annexe 1
EPELBOIN.Y, JEANNE-MICHAUD.A et ZARKA.A - J. Appl. Cryst. (1979) 12, 201
EPELBOIN.Y,AUTHIER.A - Acta Cryst. (1983) A39, 767
EPELBOIN.Y,LIFCHITZ.A - J. Appl. Cryst. (1974) 7, 377
EPELBOIN.Y,PATEL.J.R - J. Appl. Phys. (1982) 53, 271
EPELBOIN.Y,RIBET.M - Phys. Stat. Sol. (1974) A25, 507
EPELBOIN.Y,RIGLET.P - Phys. Stat. Sol. (1979) A54, 547
EWALD.P.P - Ann. Phys. (1917) 29, 736
HEAD.A.K-Computed electron micrographs and defect identification(1973)325
North Holland
HIRTH.J,LOTHE.J - Theorie of dislocations (1968) 411 Mc Graw Hill-N.Y.
KATO.N - Acta Cryst. (1961) 14, 526
KATO.N - Acta Cryst. (1968) A24, 157
KATO.N - J. Phys. Soc. Japan (1964) 19, 67 et 971
KATO.N - J. Phys. Soc. Japan (1963) 18, 1785
KATO.N,LANG.A.R - Acta Cryst. (1959) 12, 767
LANG.A.R - Acta Cryst. (1959) 12, 249
MILTAT.J,BOWEN.B.K - J. Appl. Cryst. (1975) 8, 657
NOURTIER.C,TAUPIN.D - J. Appl. Cryst. (1981) 14, 432
PENNING.P,POLDER.D - Philips Res. Repts. (1961) 16, 419
PETRASHEN.P.V - Sov. Phys. Solid State (1976) 18, 2175
PETRASHEN.P.V,CHUKHOVSKII.F.N - Sov. Phys. Solid State(1978)20,637
PETRASHEN.P.V,CHUKHOVSKII.F.N,SHULPINA.I.L -Acta Cryst.(1980) A36, 287
PETROFF.J.F,SAUVAGE.M - J. of Cryst. Growth (1978) 43, 628
RIGLET.P - Thèse de 3ème cycle (1979) Université de Paris 6
SCANDALE.E,ZARKA.A - J. of Appl. Cryst. (1982) 15, 417
STROH.A.N - Phil. Mag. (1958) 3, 625
TAKAGI.S - Acta Cryst. (1962) 15, 1311
TAKAGI.S - Jour. Phys. Soc. Japan (1969) 26, 1239
TAUPIN.D - Bull. Soc. Franç. Miner. Crist. (1964) 87, 469

- RESUME -

Nous avons écrit un programme de simulation d'images de dislocations en topographie aux rayons X en translation. Nous simulons l'expérience en sommant les intensités dues à une onde sphérique dont le point source se déplace sur la face d'entrée du cristal. Pour chaque position de ce point l'intensité réfléchie est calculée, dans un processeur vectoriel programmé en assembleur, par intégration numérique des équations aux dérivées partielles de Takagi.

Les images simulées sont en bon accord avec les topographies expérimentales, et permettent de caractériser les dislocations si celles-ci sont suffisamment inclinées dans le cristal. Dans le cas de paquets de dislocations on a mis en évidence un rapport certain entre l'image directe simulée et celle prévue à l'aide du critère de l'optique géométrique.

- MOTS CLE -

Simulation
Dislocations
Topographies
Théorie dynamique des rayons X
Processeur vectoriel

- FIGURES -

- Figure 1 :
Intersection de la surface de dispersion avec le plan d'incidence: allure générale.
- Figure 2 :
Zone de la surface de dispersion correspondant au domaine de réflexion du cristal dans le plan d'incidence.
- Figure 3 :
Variation de l'amplitude de l'onde réfléchie D_h en fonction de l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente.
- Figure 4 :
Variation de l'amplitude de l'onde réfractée D_o en fonction de l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente.
- Figure 5 :
Construction du vecteur de Poynting donnant la direction de propagation de l'énergie.
- Figure 6 :
Variation du module et de la direction du vecteur de Poynting en fonction de la position du point caractéristique sur la surface de dispersion.
- Figure 7 :
Propagation de l'énergie dans le triangle de Borrmann et franges de Kato (en pointillés).
- Figure 8 :
Points caractéristiques des deux champs d'ondes se propageant dans une direction identique.
- Figure 9 :
Montage expérimental de Lang pour les topographies en transmission.
- Figure 10:
Topographie en pose fixe: dislocation dans un cristal de Silicium de 800 microns d'épaisseur. Réflexion $\bar{2}\bar{2}0$ avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$.
- Figure 11:
Formation des différentes parties d'une image de dislocation lors d'une topographie en transmission.
1 = image directe
2 = image intermédiaire
3 = image dynamique
- Figure 12:
Topographie en translation: à droite, dislocation identique à celle de la figure 10.

- Figure 13:
Principe d'intégration des équations de Takagi.
- Figure 14:
Origine de l'intensité arrivant en un point P de la face de sortie du cristal lors d'une topographie en translation.
- Figure 15:
Deux méthodes pour simuler une topographie en translation:
a- superposition d'ondes planes ayant des écarts à l'incidence de Bragg variables.
b- addition d'ondes sphériques dont le point source se déplace de 0 à 0'.
- Figure 16:
Simulation du profil de translation correspondant à la figure 17. (Epelboin 1977).
- Figure 17:
Profil densitométrique d'une plaque photographique d'une topographie en translation. Cristal de Silicium de 226 microns d'épaisseur. Réflexion 220 avec MoK α . Dislocation parallèle à la surface (profondeur 200 microns) Vecteur de Burgers $1/2 [10\bar{1}]$.
- Figure 18:
Allure de la fonction de Bessel Jo.
- Figure 19:
a- Réseau d'intégration à pas variables.
b- Réseau d'intégration à pas variables avec raffinement.
- Figure 20:
Simulation de la topographie en pose fixe de la figure 10 avec le programme DEFV à pas variables. (Epelboin 1983).
- Figure 21:
Simulation de la topographie en pose fixe de la figure 10, avec prise en compte de la largeur de fente. (Authier et Epelboin 1983). Image visualisée sur Péricolor 2000.
- Figure 22:
Profil densitométrique effectué légèrement au dessus du milieu de l'image de la dislocation située à droite sur la topographie de la figure 12.
- Figure 23:
Comparaison du profil simulé grâce au programme ADELE (méthode par addition d'ondes sphériques) avec le profil densitométrique de la figure 22.
- Figure 24:
Montage direct à considérer pour appliquer le théorème de réciprocité (Kato 1968). Intensité arrivant au point Q de la

plaque photographique pour une position A1 de la source.

- Figure 25:
Théorème de réciprocité (Kato 1968): géométrie réciproque de la figure 24. L'intensité arrivant en S depuis la source fictive placée en Q est identique à celle arrivant en Q sur la figure 24.
- Figure 26:
Comparaison des profils simulés par le programme ADELE (méthode par addition d'ondes sphériques) et le programme TRANSL (méthode réciproque de Kato).
- Figure 27:
Comparaison de deux profils de translation simulés avec les programmes ADELE et TRANSL. Dislocation dans un cristal de Ga-As de 170 microns d'épaisseur. Réflexion 220 avec $\text{MoK}\alpha$.
- Figure 28:
Comparaison de deux profils de translation simulés avec les programmes ADELE et TRANSL. Dislocation dans un cristal de Silicium de 400 microns d'épaisseur. Réflexion $\bar{2}\bar{2}0$ avec $\text{MoK}\alpha$.
- Figure 29:
Simulation d'une section. Dislocation dans un cristal de Silicium de 400 microns d'épaisseur. Réflexion $\bar{2}\bar{2}0$ avec $\text{MoK}\alpha$. La géométrie est celle de la figure 24, et on choisit le point Q au sommet du pic de l'image directe.
- Figure 30:
Simulation réciproque de celle de la figure 29. La géométrie est identique à celle de la figure 25. Le point d'observation S est indiqué par une flèche.
- Figure 31:
Ensemble des outils informatiques mis en oeuvre pour la simulation des images de dislocation en translation.
INIT: programme d'initialisation
ADELE: programme de calcul des images
VISUAL: programme pour la visualisation sur Péricolor 2000
- Figure 32:
Architecture interne du processeur vectoriel FPS100.
- Figure 33:
Exemple de programme FORTRAN utilisant le processeur vectoriel FPS100 pour effectuer la transformée de Fourier d'un tableau TAB et l'inversion d'une matrice MAT.
- Figure 34:
Organigramme de la marche à suivre pour générer le module exécutable d'un programme utilisant le FPS100.
- Figure 35:
Rôle du programme INIT et principe d'organisation du système de

sauvegardes.

- Figure 36:
Les six étapes principales des calculs préparatoires.
- Figure 37:
Différents repères utilisés dans le programme de calcul ADELE.
- Figure 38:
Principe du calcul d'une ligne d'image entre les points P1 et P2 de la plaque photographique lors d'une translation.
- Figure 39:
Indexation des noeuds et des pas de calcul du réseau d'intégration des équations de Takagi.
- Figure 40:
-Eclatement du tableau contenant les intensités calculées pour une position du point source afin de se ramener à un échantillonnage de points équidistants.
-Somme des tableaux éclatés obtenus pour les différentes positions du point source Ai.
-Apodisation du tableau final.
- Figure 41:
Zones des triangles de Borrmann où l'on se contente de calculer les amplitudes pour gagner du temps.
- Figure 42:
Organigramme du sous-programme PL.
- Figure 43:
Choix du réseau d'intégration à utiliser suivant la position du point source sur la face d'entrée.
- Figure 44:
Exemple de temps de calcul d'une ligne d'image sur différents ordinateurs.
- Figure 45:
Repère macroscopique imposé à l'utilisateur.
- Figure 46:
Représentation d'une image simulée par un dessin effectué à la main. (Balibar et Authier - 1967).
- Figure 47:
Représentation d'une image simulée sur une imprimante par superposition de caractères. (Epelboin et Lifchitz - 1974).
- Figure 48:
Représentation point par point d'une image simulée sur un écran graphique Tektronix. (Epelboin - 1978).

- Figure 49:
Courbes de réponses expérimentale et simulée des émulsions nucléaires Ilford L4 utilisées en topographie aux rayons X. (Epelboin, Jeanne-Michaud et Zarka - 1979).
- Figure 50:
Normalisation du logarithme des intensités calculées sur 256 niveaux de gris pour le Péricolor 2000.
- Figure 51:
Géométrie de la dislocation dont la topographie en translation due à Authier est représentée sur la figure 12 (dislocation de droite).
- Figure 52:
Simulation en translation de l'image de la dislocation située à droite sur la figure 12. Vecteur de Burgers $1/2[10\bar{1}]$. Taille en microns 400x330. Résolution de 0.8 micron. Calcul d'une ligne d'image sur trois. Temps de calcul 61h.
- Figure 53:
Simulation identique à la précédente mais avec le vecteur de Burgers inversé: $\bar{b} = 1/2[\bar{1}01]$.
- Figure 54:
Simulation identique à celle de la figure 52, mais avec une résolution de 1.6 micron. Temps de calcul 15h20mn.
- Figure 55:
Simulation identique à celle de la figure 52, mais avec une résolution de 2.4 microns. Temps de calcul 6h10mn.
- Figure 56:
Simulation identique à celle de la figure 52, mais avec une résolution de 2.4 microns et en calculant une ligne d'image sur deux. Temps de calcul 11h25mn.
- Figure 57:
Simulation identique à celle de la figure 52, mais avec une résolution de 3.2 microns. Calcul d'une ligne d'image sur deux. Temps de calcul 5h12mn.
- Figure 58:
Simulation identique à la précédente, mais avec le vecteur de Burgers inversé.
- Figure 59:
Topographie en translation réalisée par Lefeld Sosnowska sur un cristal de Silicium de 440 microns d'épaisseur. Réflexion $3\bar{3}\bar{3}$ avec le rayonnement $MoK\alpha$.
- Figure 60:
Géométrie du groupe de dislocations situé en haut de la figure 59.

Figure 61:

Simulation en translation de l'image de la dislocation située en haut de la figure 59. Vecteur de Burgers $1/2[01\bar{1}]$. Taille en microns: 1500 en largeur. Résolution de 2.4 microns. Calcul d'une ligne d'image sur trois. Temps de calcul 22h.

Figure 62:

Simulation identique à la précédente, mais avec le vecteur de Burgers inverse: $\bar{b} = 1/2[0\bar{1}1]$.

Figure 63:

Topographie en translation réalisée par Dunia et al. (1980) sur un cristal de KDP de 1100 microns d'épaisseur. Réflexion 220 avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$.

Figure 64:

Géométrie des deux dislocations de la topographie de la figure 63.

Figure 65:

Simulation en translation de l'image de la dislocation située à gauche de la figure 63. Taille en microns 500x240. Résolution de 1.6 micron. Calcul d'une ligne d'image sur deux. Temps de calcul 11h30mn.

Figure 66:

Simulation identique à la précédente, mais avec le vecteur de Burgers inverse: $\bar{b} = [00\bar{1}]$. Correspond à la dislocation de droite sur la figure 63.

Figure 67:

Les différents vecteurs de Burgers possibles pour les dislocations étudiées par Petroff et Sauvage (1978) dont une image est représentée sur la figure suivante.

Figure 68:

Topographie en translation réalisée par Petroff et Sauvage (1978) sur un cristal de Ga-As de 316 microns d'épaisseur sur lequel on a effectué une épitaxie de 1.3 micron. Réflexion $4\bar{2}\bar{2}$ avec le rayonnement synchrotron blanc du LURE.

Figure 69:

Simulation en translation des images des différentes dislocations présentes sur la topographie de la figure 68. Résolution de 1.6 micron. Calcul d'une ligne d'image sur deux. Taille en micron de chaque image: 100x45.

Figure 70:

Profil d'intensité tracé perpendiculairement à la dislocation de vecteur de Burgers b_1 sur la figure 69.

Figure 71:

Profil d'intensité tracé perpendiculairement à la dislocation de

vecteur de Burgers \vec{b}_1' sur la figure 69.

Figure 72: Profil d'intensité tracé perpendiculairement à la dislocation de vecteur de Burgers \vec{b}_1 sur la figure 69.

Figure 73: Profil d'intensité tracé perpendiculairement à la dislocation de vecteur de Burgers \vec{b}_2 sur la figure 69.

Figure 74: Topographie en translation réalisée par Ribet (1974) sur un cristal de formiate de Lithium de 1200 microns d'épaisseur. Réflexion 200 avec le rayonnement $\text{AgK}\alpha$. Paquet de dislocations.

Figure 75: Topographie identique à la précédente, mais pour la réflexion $1\bar{1}0$.

Figure 76: Zone, dans un plan perpendiculaire au paquet de dislocations, donnant naissance à l'image directe de ce paquet d'après le critère de la dérivée première d'Authier. Réflexion 200.

Figure 77: Figure identique à la précédente, mais pour la réflexion $1\bar{1}0$.

Figure 78: Simulation en translation de l'image du paquet de dislocations de la figure 74. Taille en microns 400x600. Résolution de 2.4 microns. Calcul d'une ligne d'image sur trois. Temps de calcul 3h30mn.

Figure 79: Simulation identique à la précédente, mais pour la réflexion $1\bar{1}0$. Correspond à la topographie de la figure 75. Temps de calcul 2h30mn.

Figure 80: Zone, dans un plan perpendiculaire au paquet de dislocations, donnant naissance à l'image directe de ce paquet d'après le critère de la dérivée seconde de Balibar. Réflexion 200.

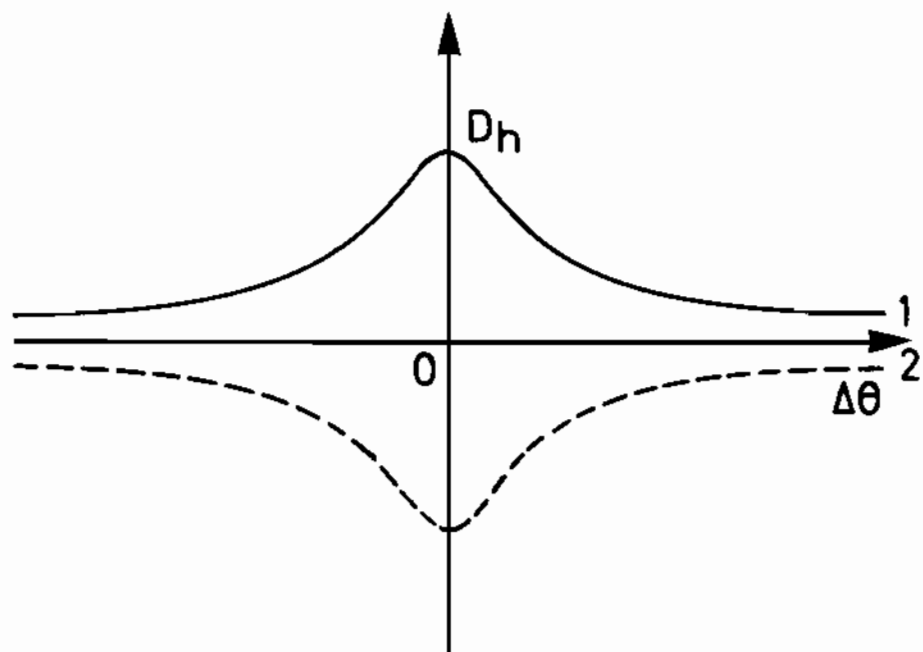
Figure 81: Figure identique à la précédente, mais pour la réflexion $1\bar{1}0$.

Figure 82: Formation de l'image directe pour les paquets de dislocations et les canaux lors d'une topographie en translation.

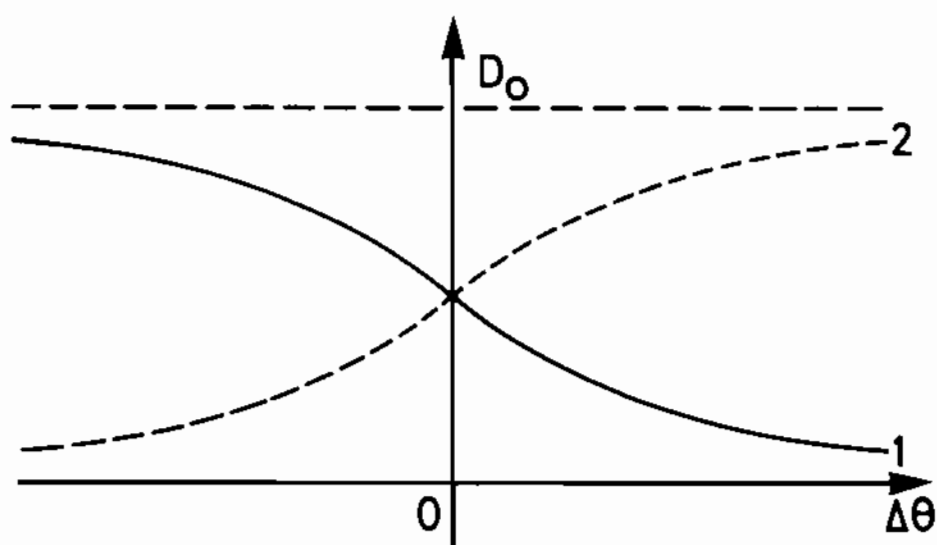
Figure 83: Topographie en translation réalisée par Zarka (1982) sur une lame de Béryl de 1400 microns d'épaisseur. Réflexion $1\bar{1}0$ avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$. Le canal étudié est indiqué par une flèche.

- Figure 84:
Zone, dans un plan perpendiculaire au canal, donnant naissance à l'image directe de ce canal d'après le critère de la dérivée première d'Authier.
- Figure 85:
Simulation en translation de l'image du canal indiqué par une flèche sur la figure 83. Vecteur de Burgers global ($100\vec{a}+150\vec{b}$). Taille en microns 200x200. Résolution de 1.6 micron. Calcul d'une ligne d'image sur trois.
- Figure 86:
Zone, dans un plan perpendiculaire au canal, donnant naissance à l'image directe de ce canal d'après le critère de la dérivée seconde de Balibar.
- Figure 87:
Simulation identique à celle de la figure 85, mais avec un vecteur de Burgers global $\vec{b} = (200\vec{a}+300\vec{b})$. Taille en micron 250x250.
- Figure 88:
Simulation identique à celle de la figure 85, mais avec un vecteur de Burgers global $\vec{b} = (20\vec{a}+30\vec{b})$.
- Figure 89:
Simulation identique à celle de la figure 85, mais avec un vecteur de Burgers global $\vec{b} = (50\vec{a}+75\vec{b})$.
- Figure 90:
Simulation identique à celle de la figure 78, mais avec un vecteur de Burgers global $\vec{b} = (5\vec{a}+3\vec{b}-9\vec{c})$.
- Figure 91:
Topographie en pose fixe réalisée par Lefeld Sosnowska sur la dislocation située en haut de la figure 59. Réflexion $\bar{3}\bar{3}3$ avec le rayonnement $\text{MoK}\alpha$.
- Figure 92:
Simulation de la section de la figure 91. Taille en microns: 300x300. Résolution de 2.4 microns. Calcul d'une ligne d'image sur trois. Temps de calcul 3mn20s.
- Figure 93:
Simulation de la section de la figure 91. Taille en microns: 300x300. Résolution de 2.4 microns. Calcul d'une ligne d'image sur deux. Temps de calcul 15mn pour une largeur de fente de 12 microns.

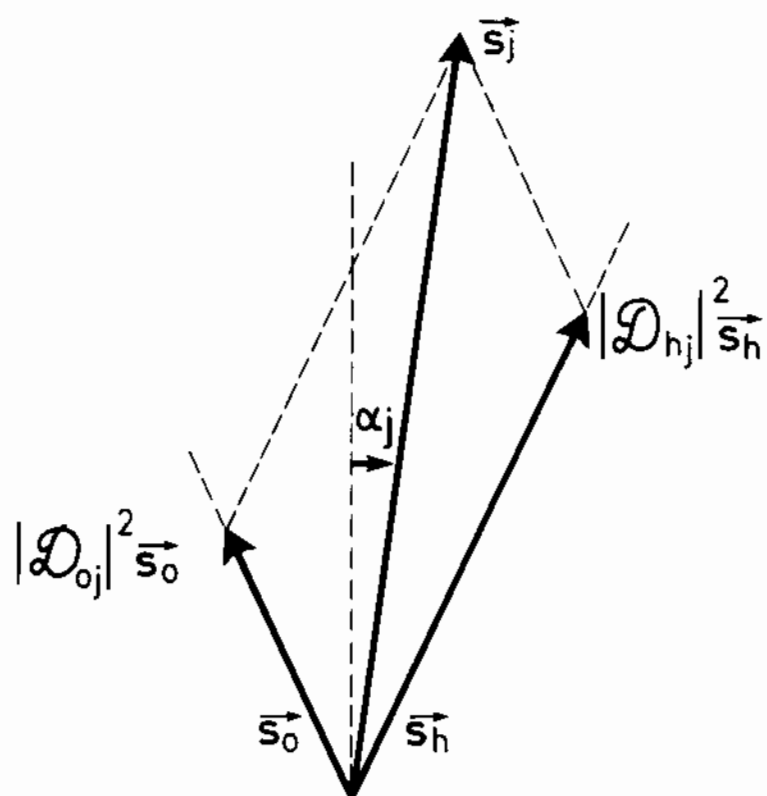




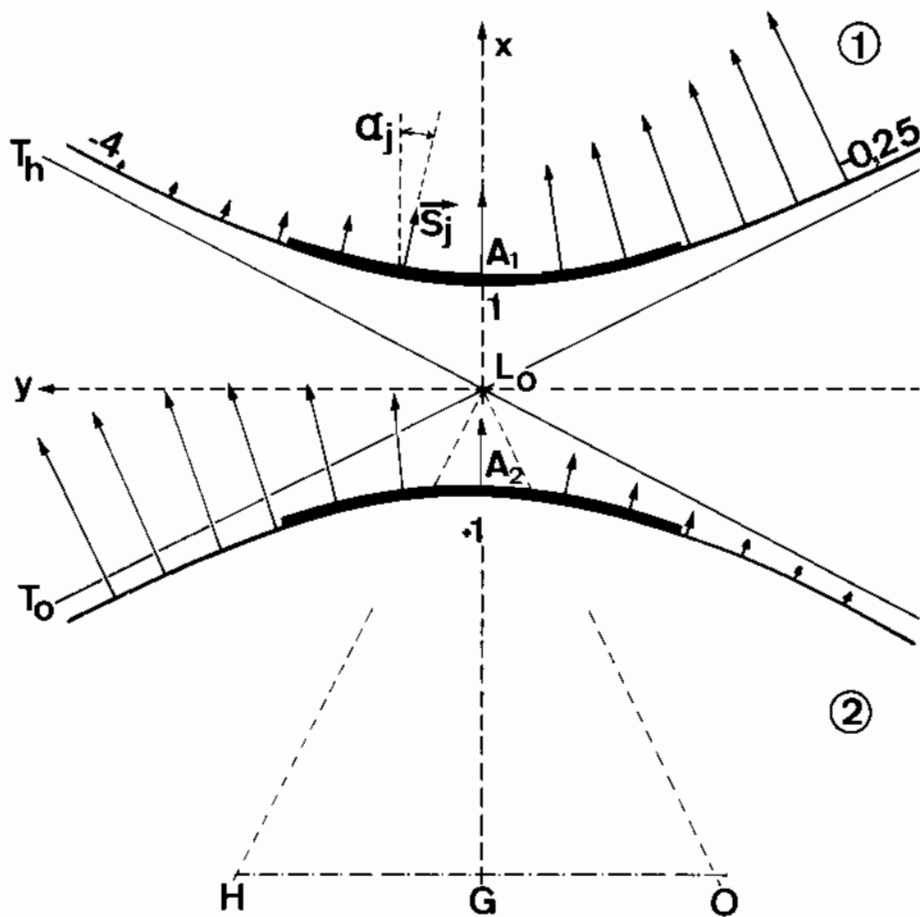
3



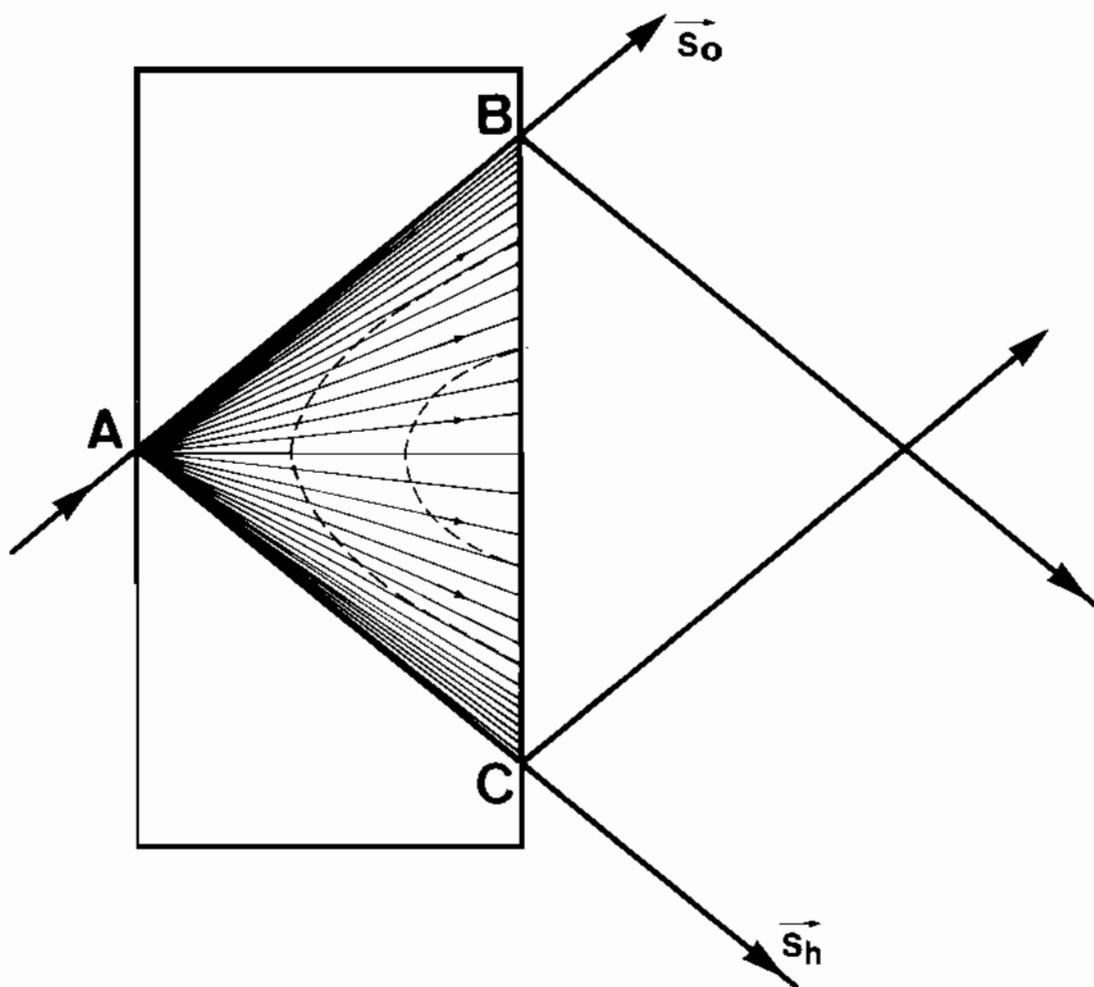
4



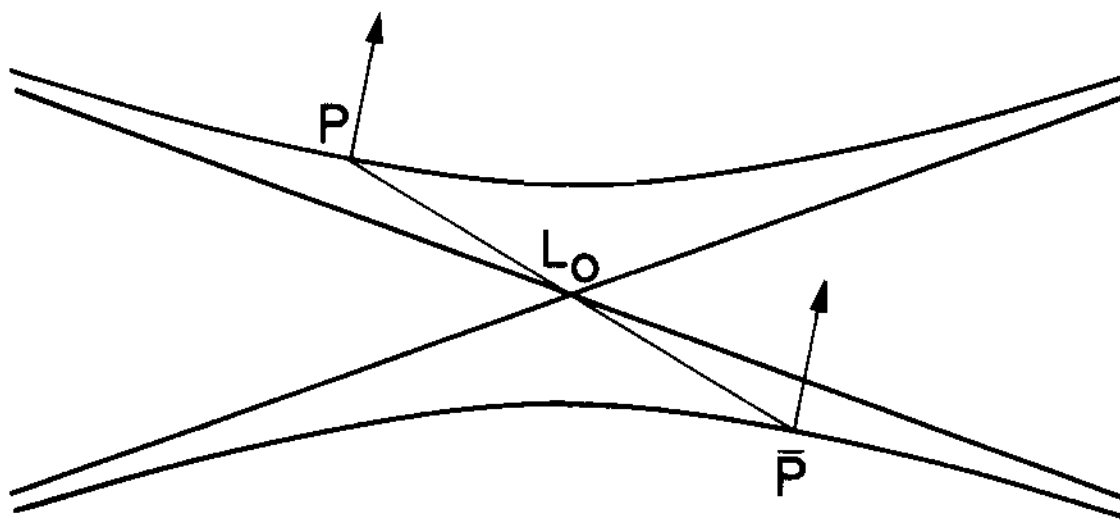
5



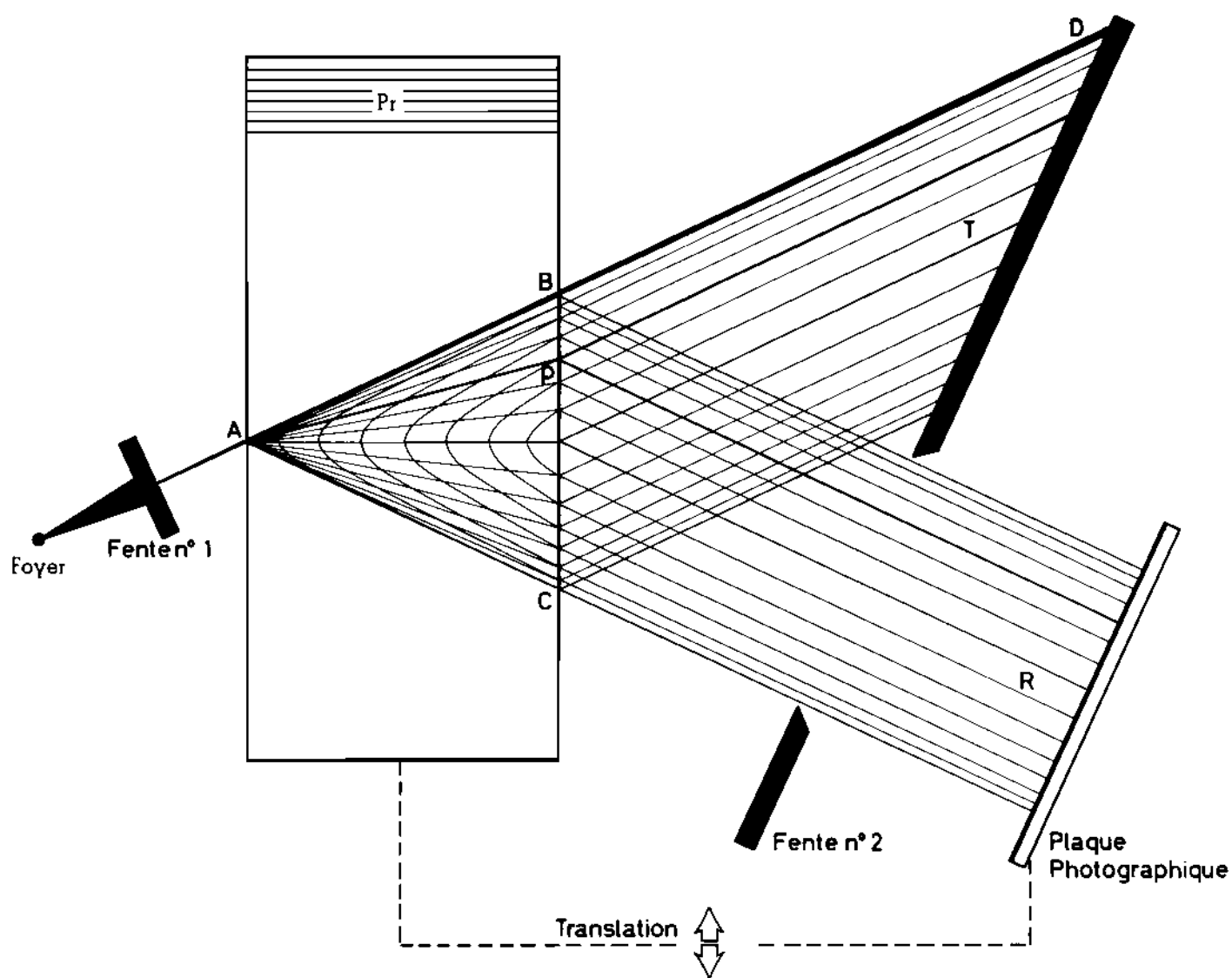
6



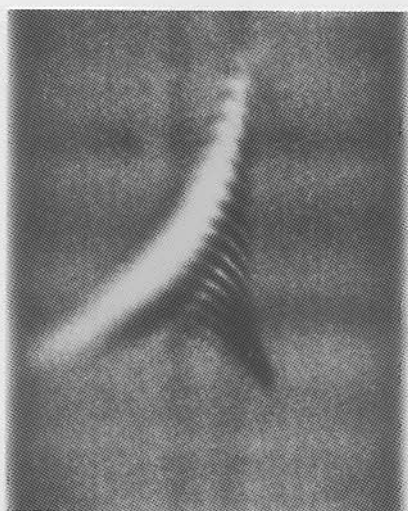
7



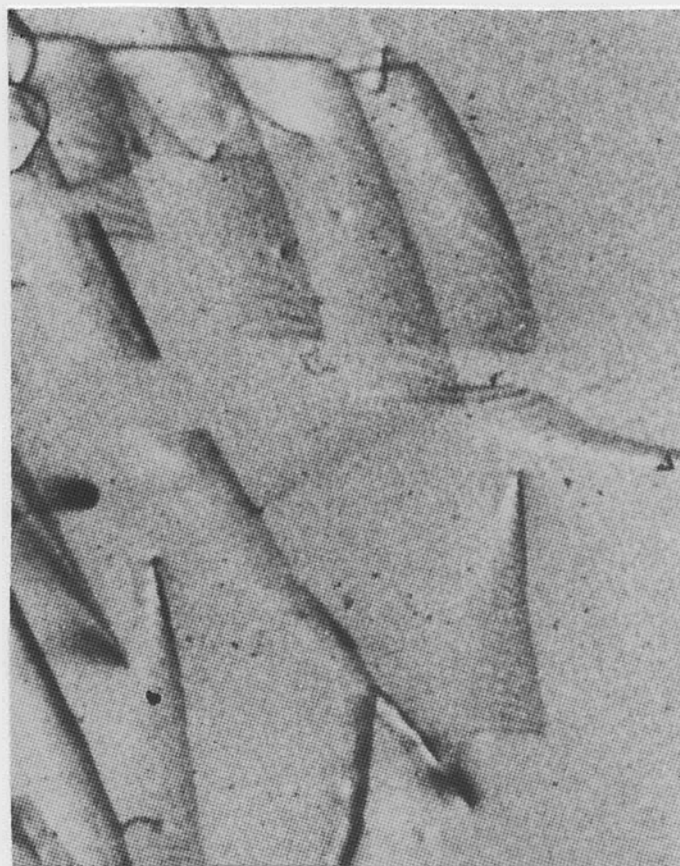
8



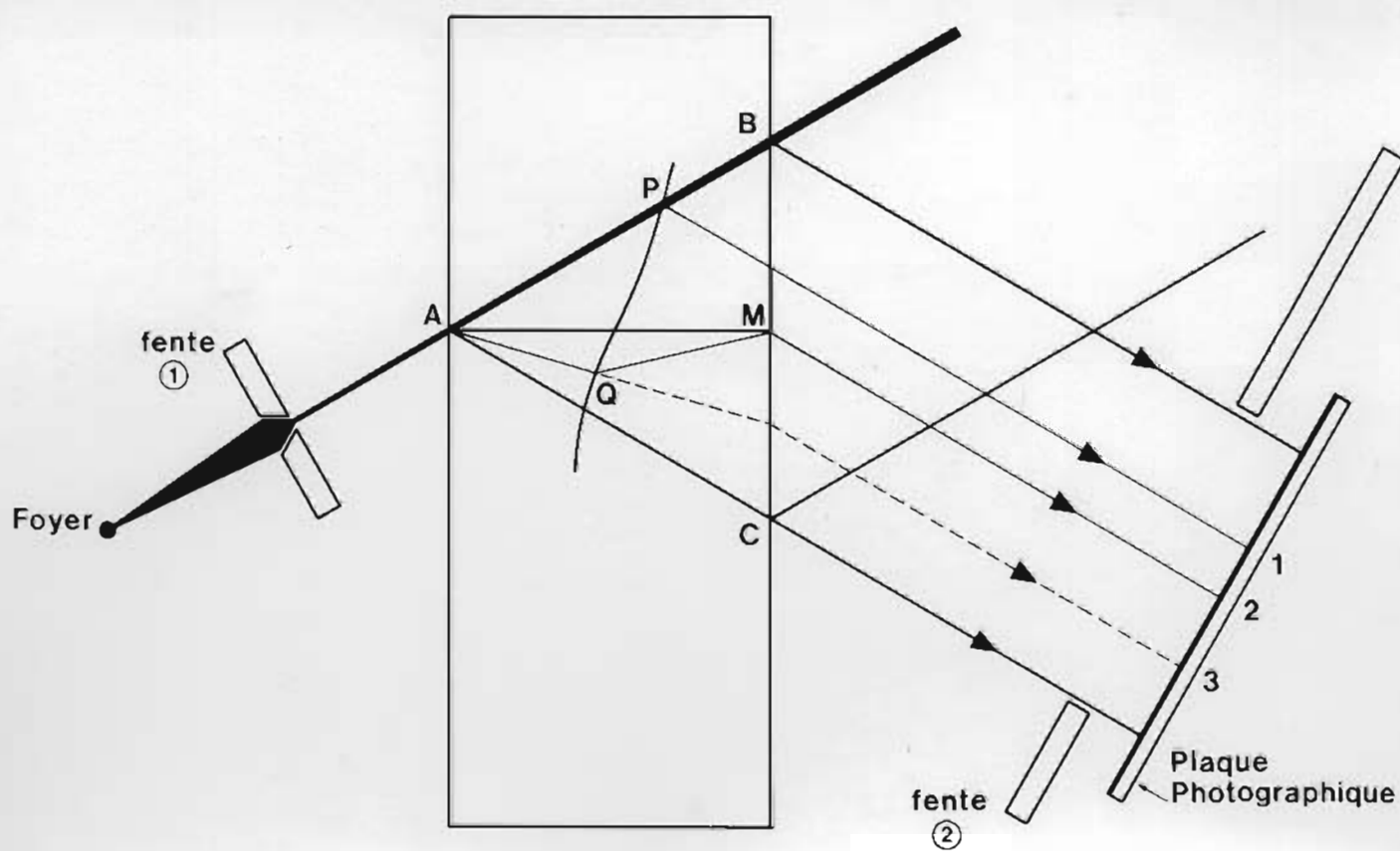
9



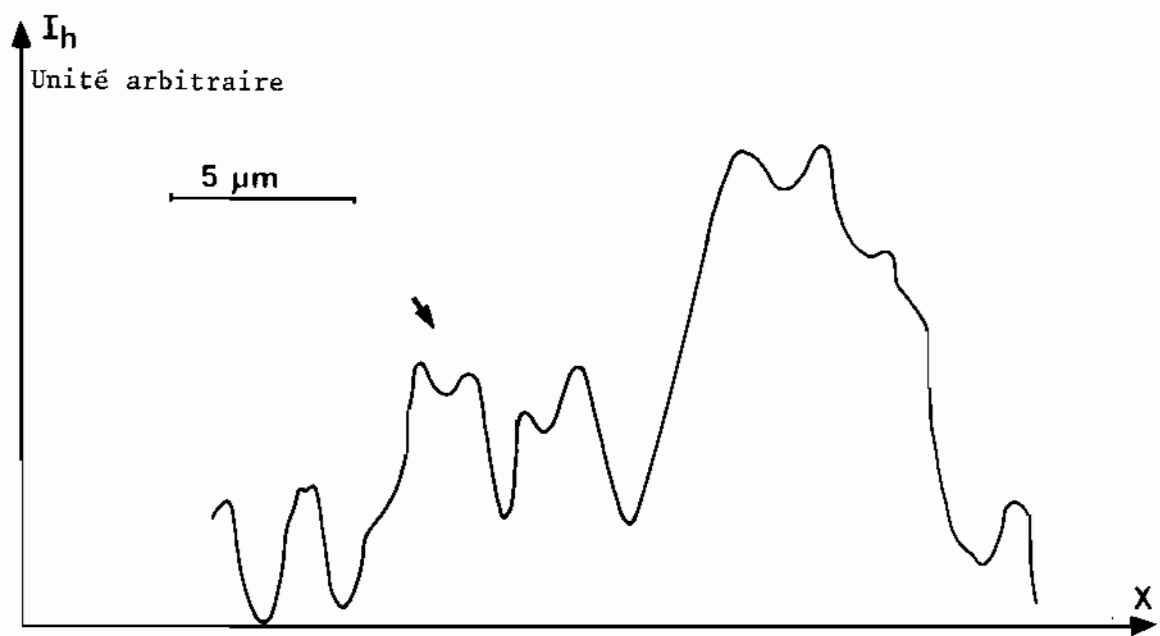
10



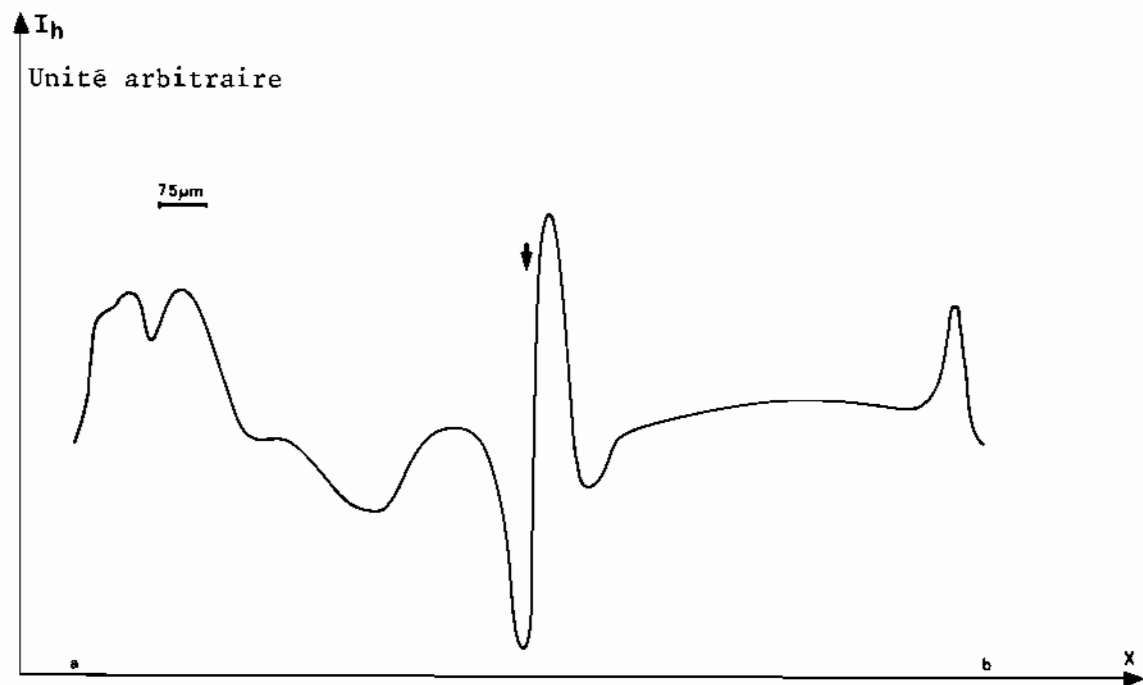
12



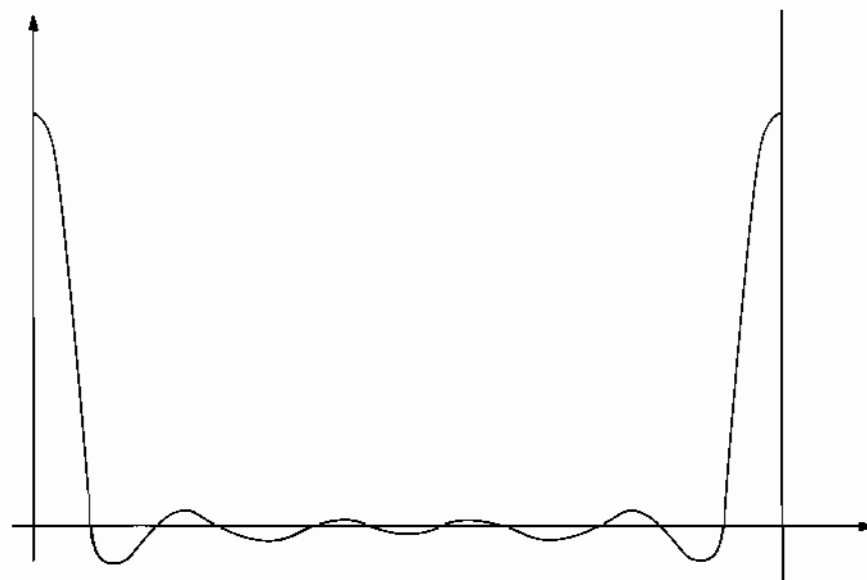
11



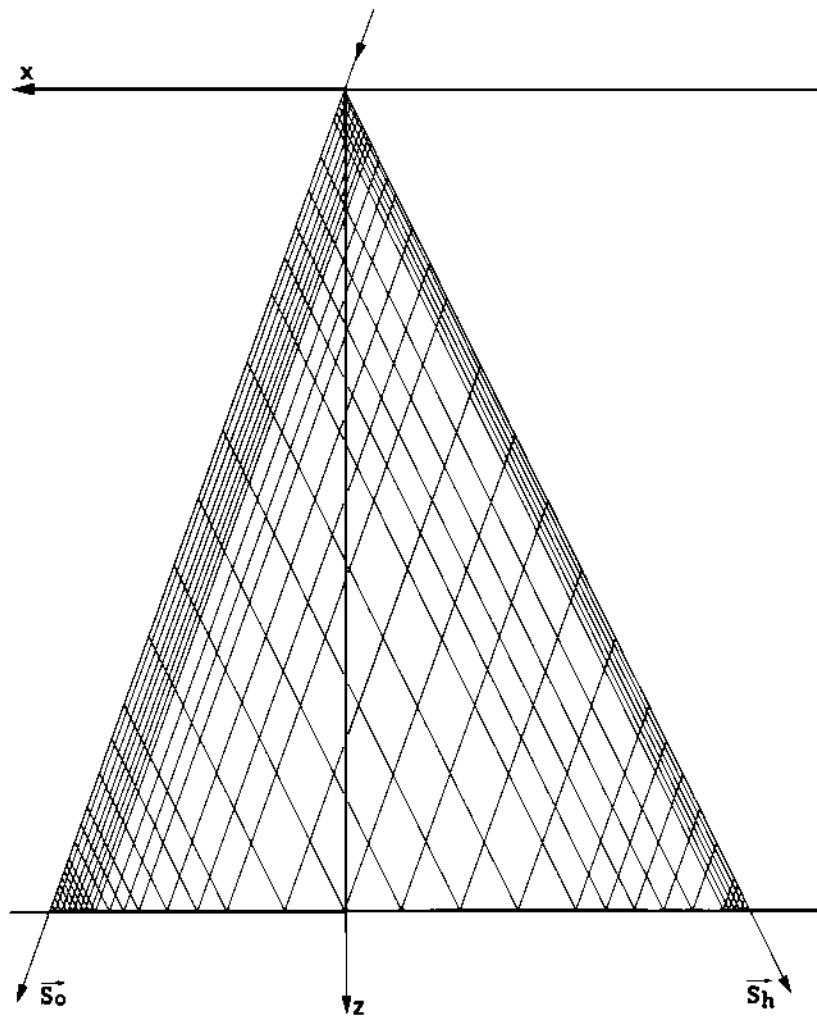
17



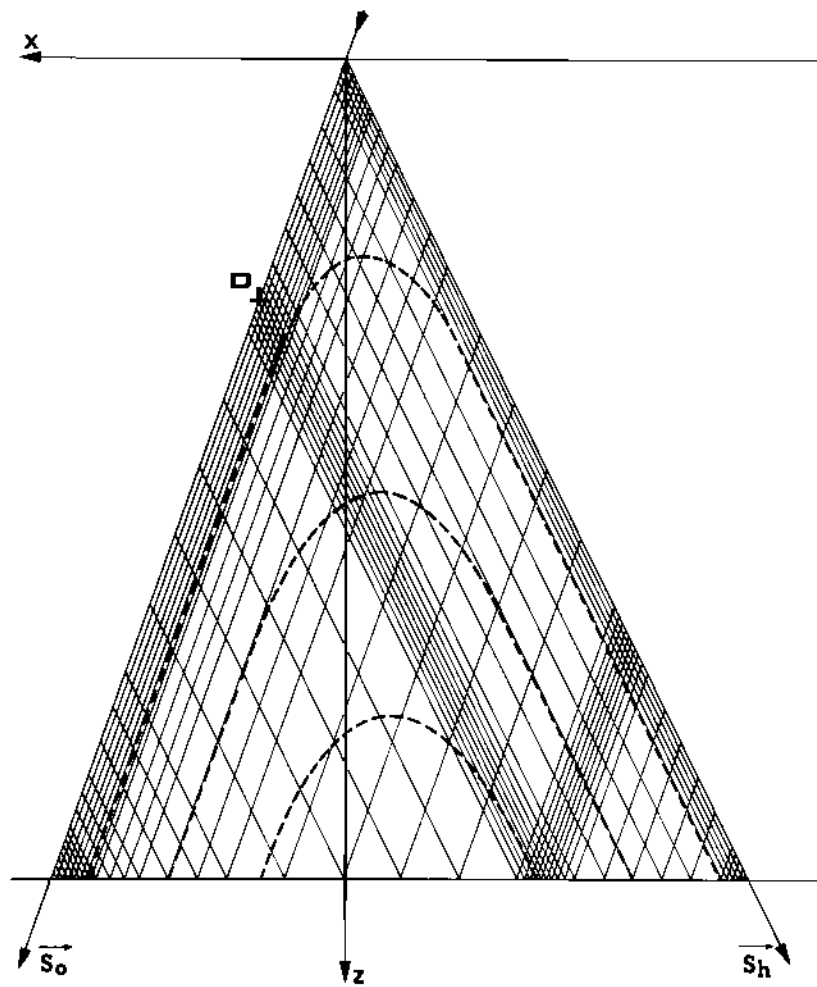
16



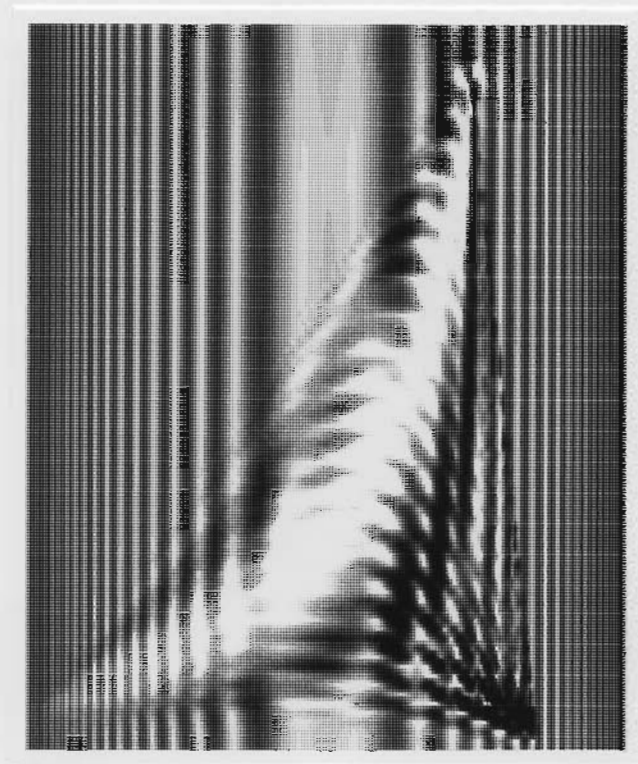
18



19
a



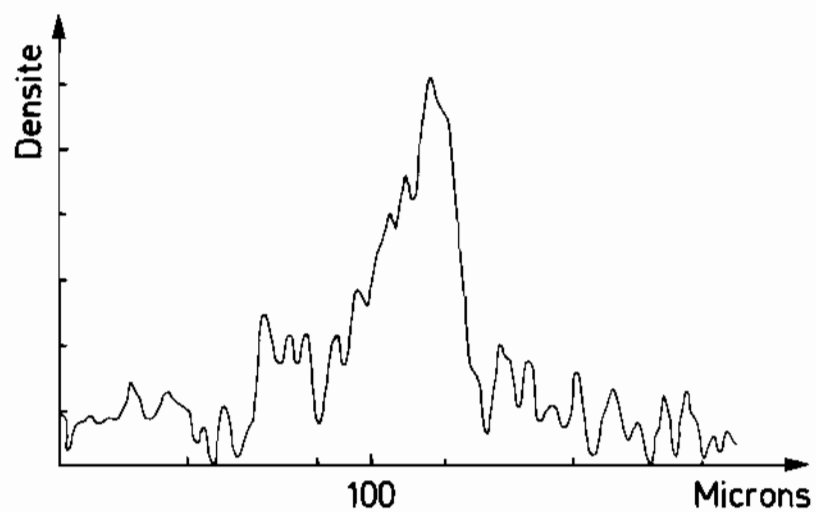
19
b



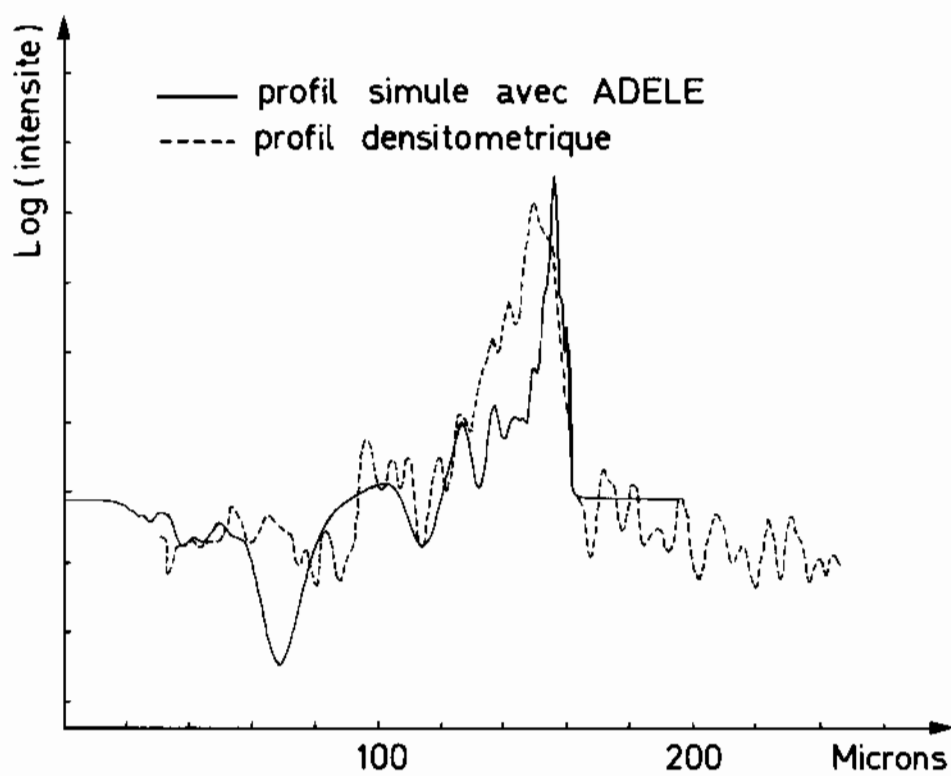
20



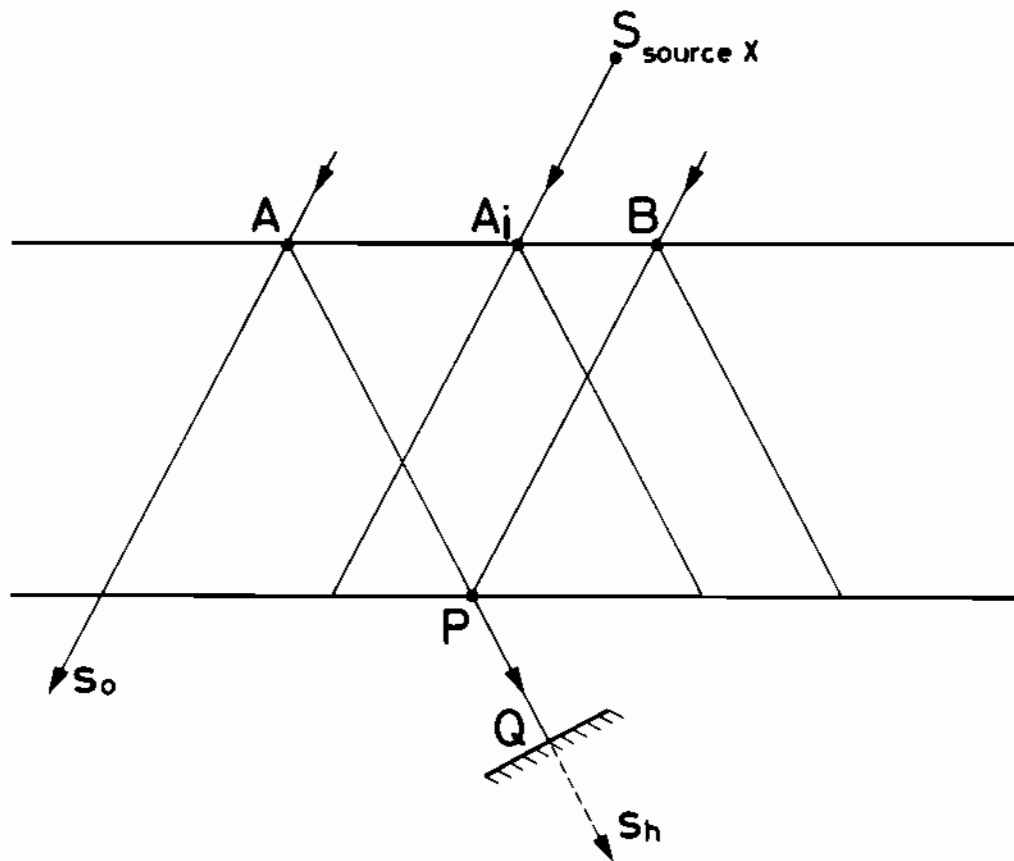
21



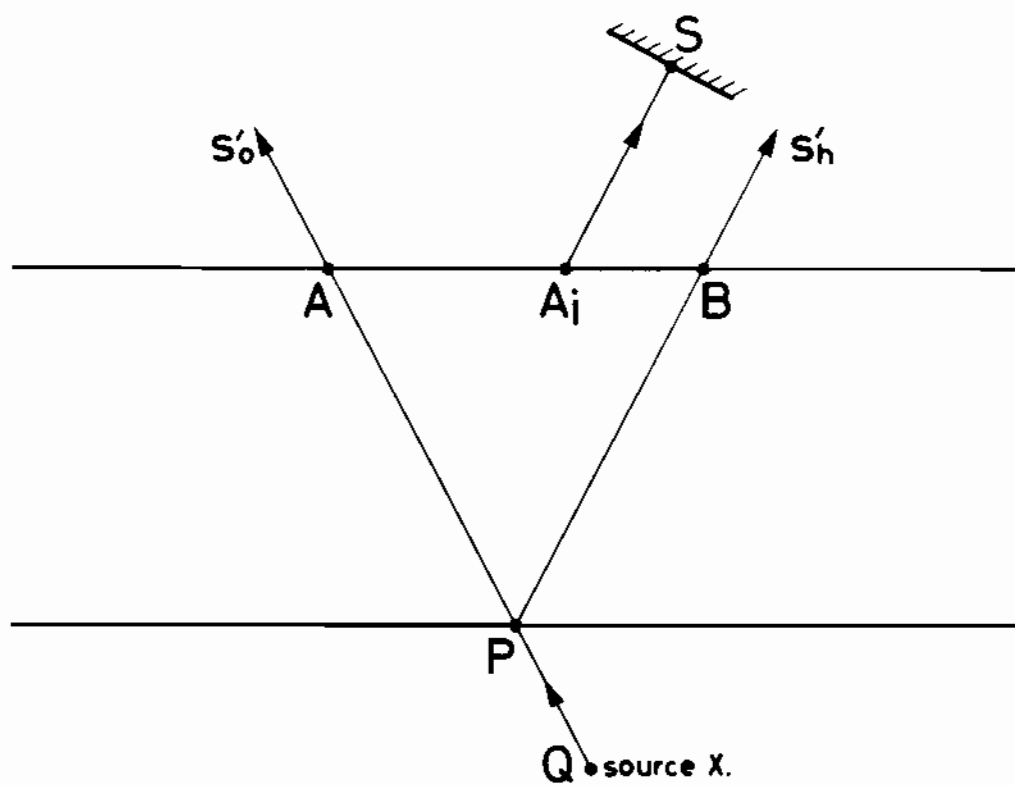
22



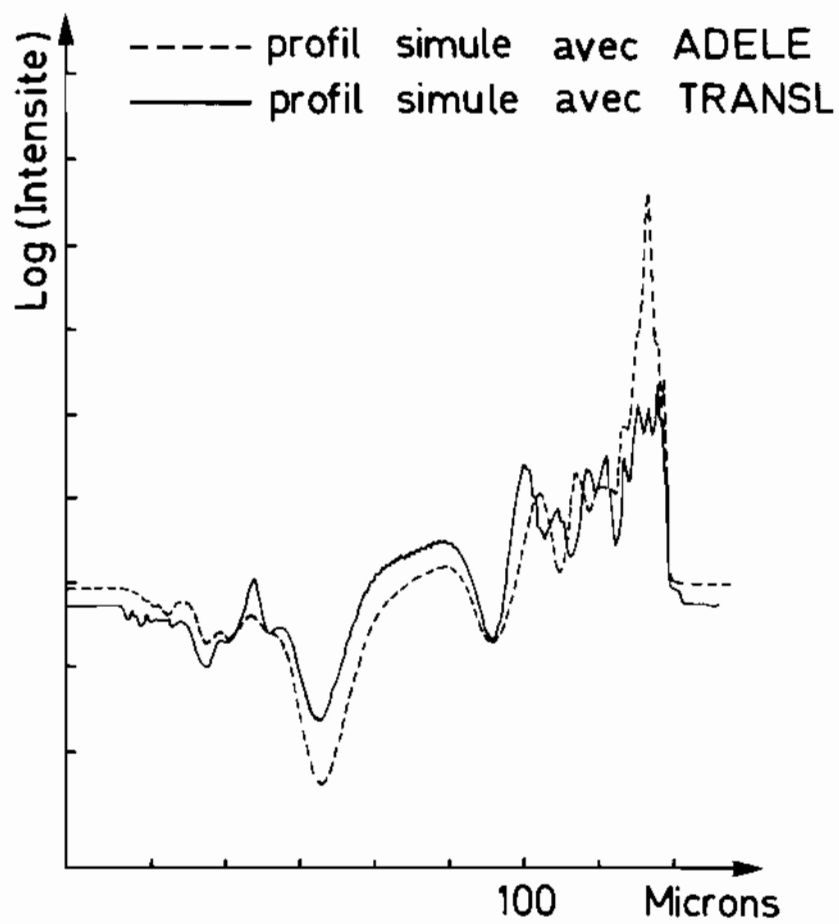
23



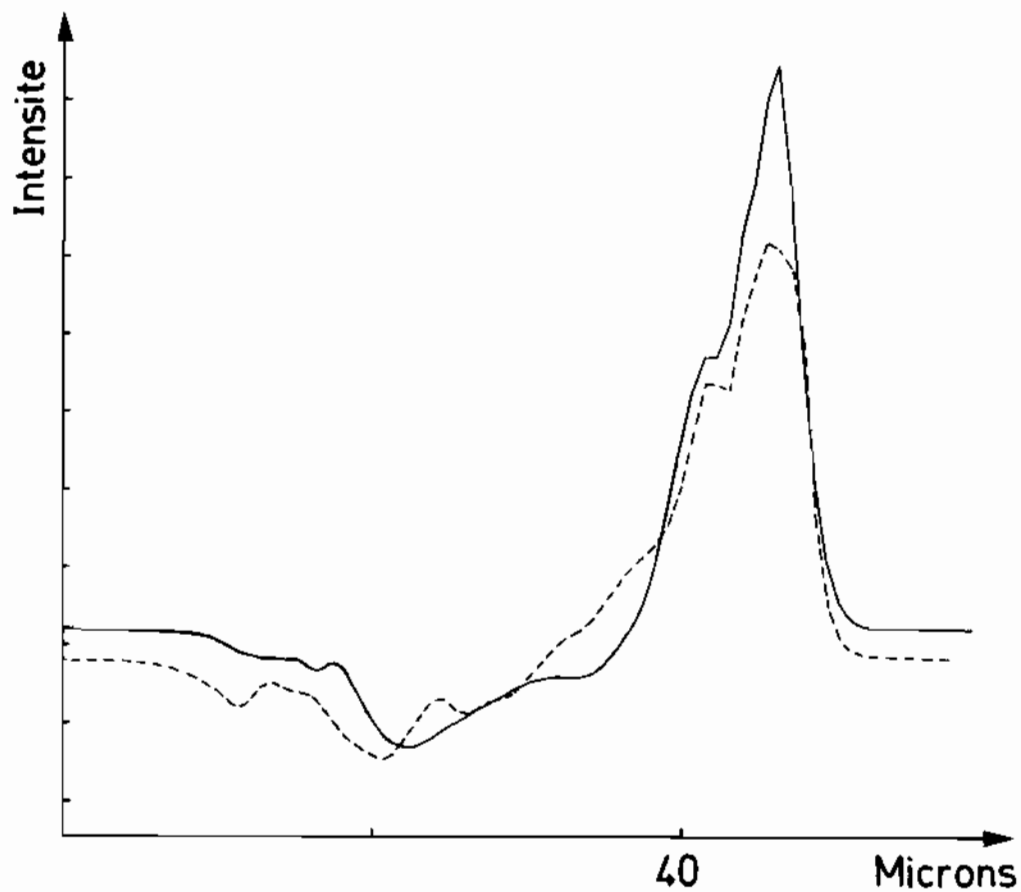
24

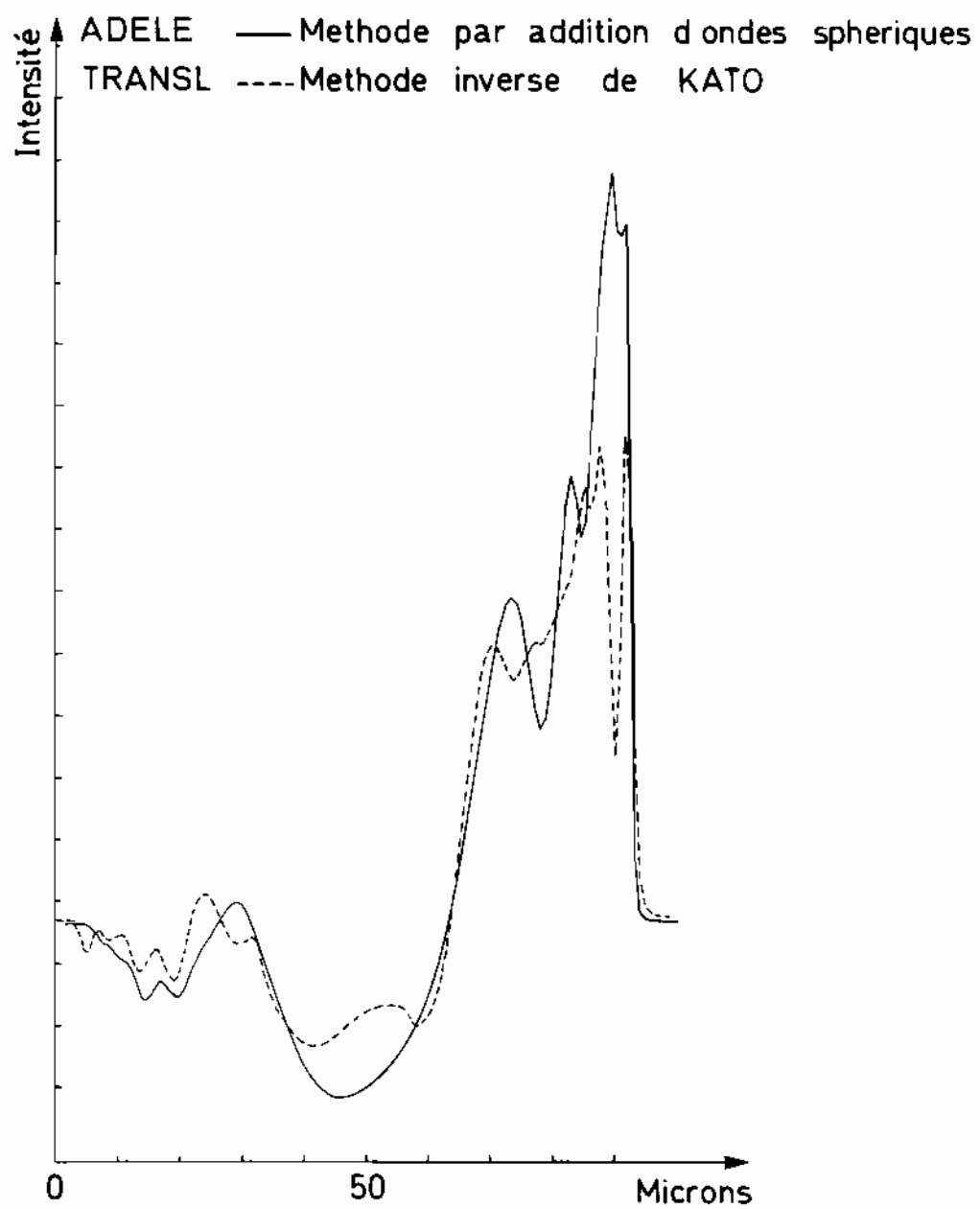


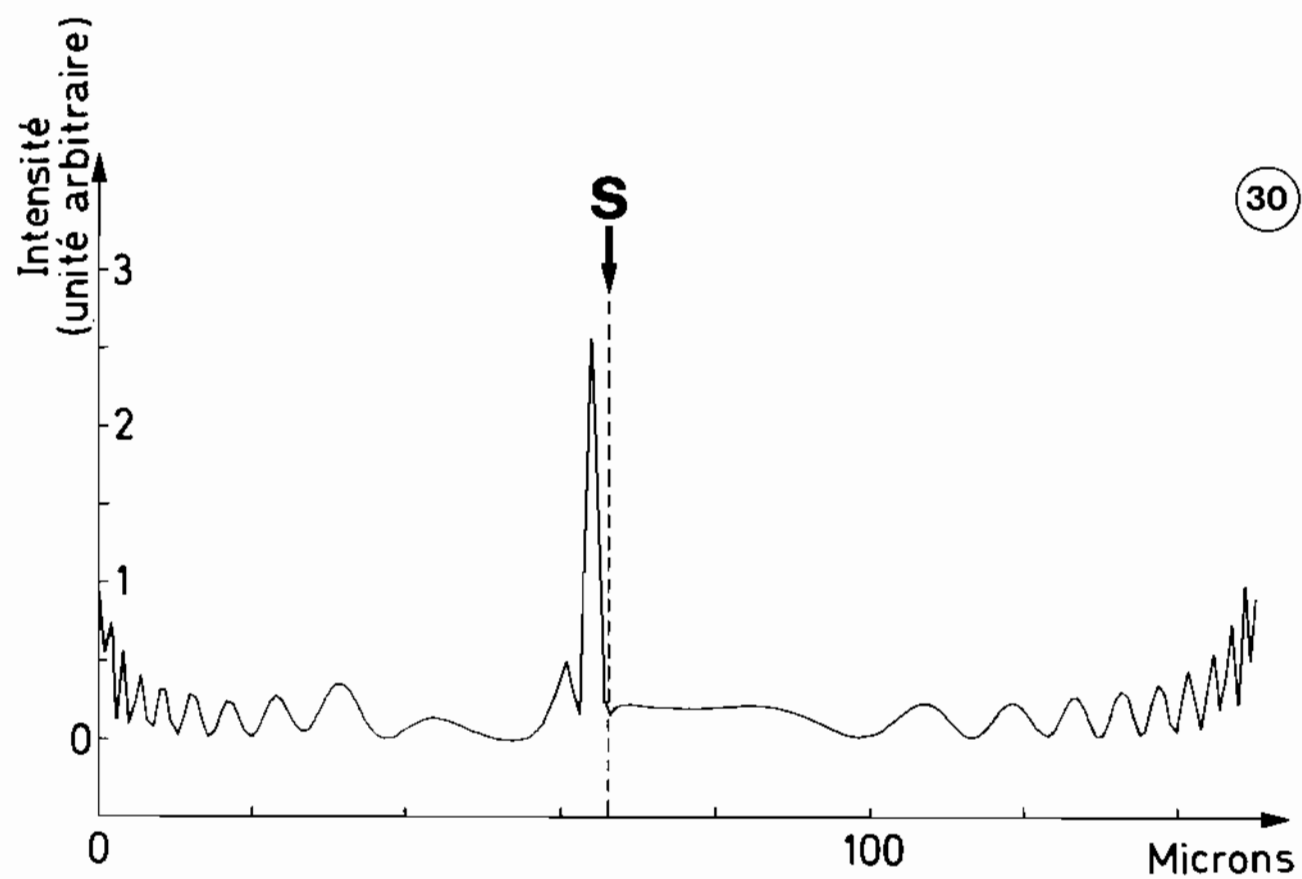
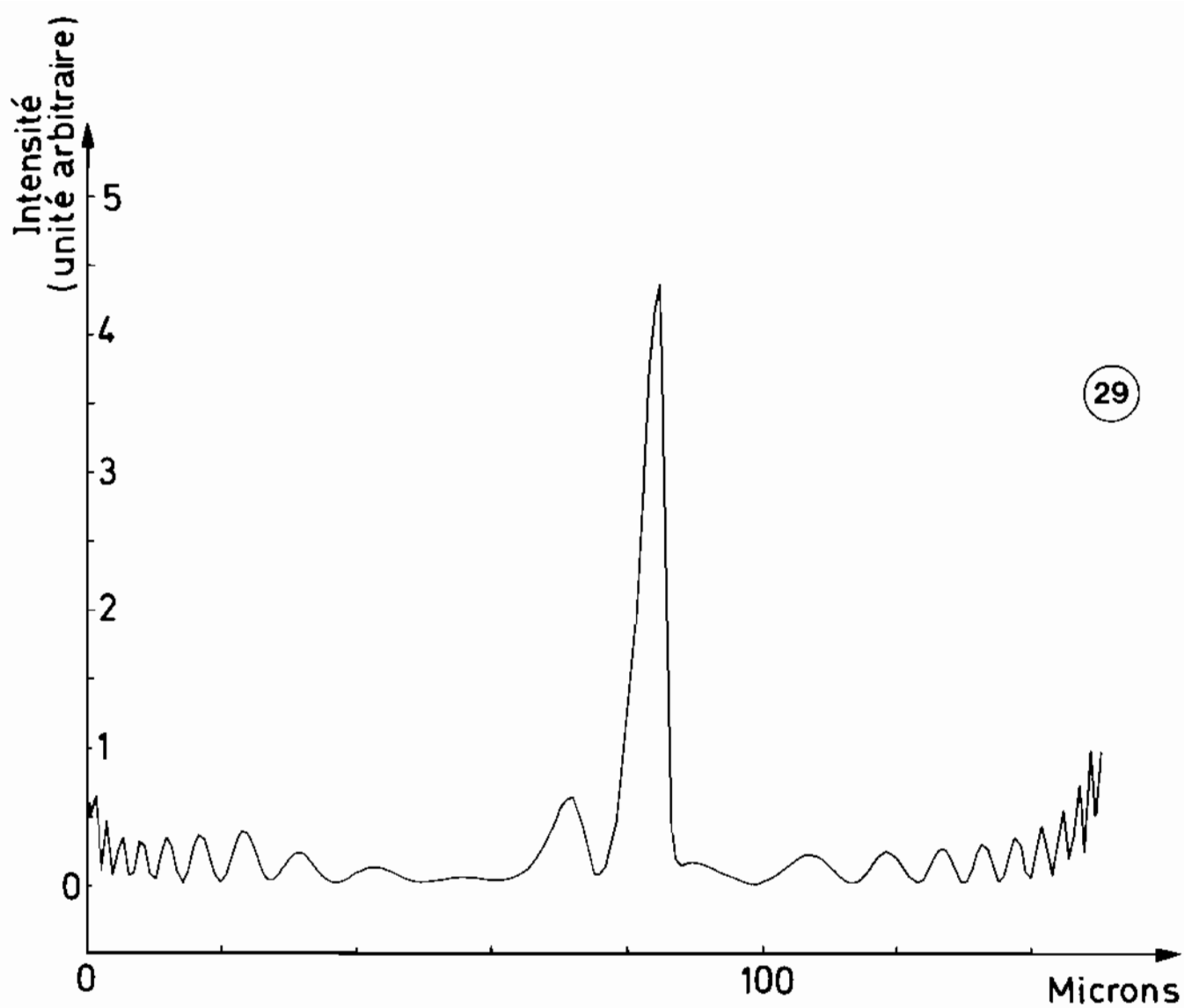
25



ADELE — Methode par addition d'ondes sphériques
 TRANSL ---- Methode inverse de KATO







Programme:

Fonction:

Machine utilisée:

INIT

Entrée des données
et initialisations

Mini-ordinateur
Mini6 BULL

Calculs préparatoires

ADELE

Calcul de l'image
par intégration des
équations de Takagi

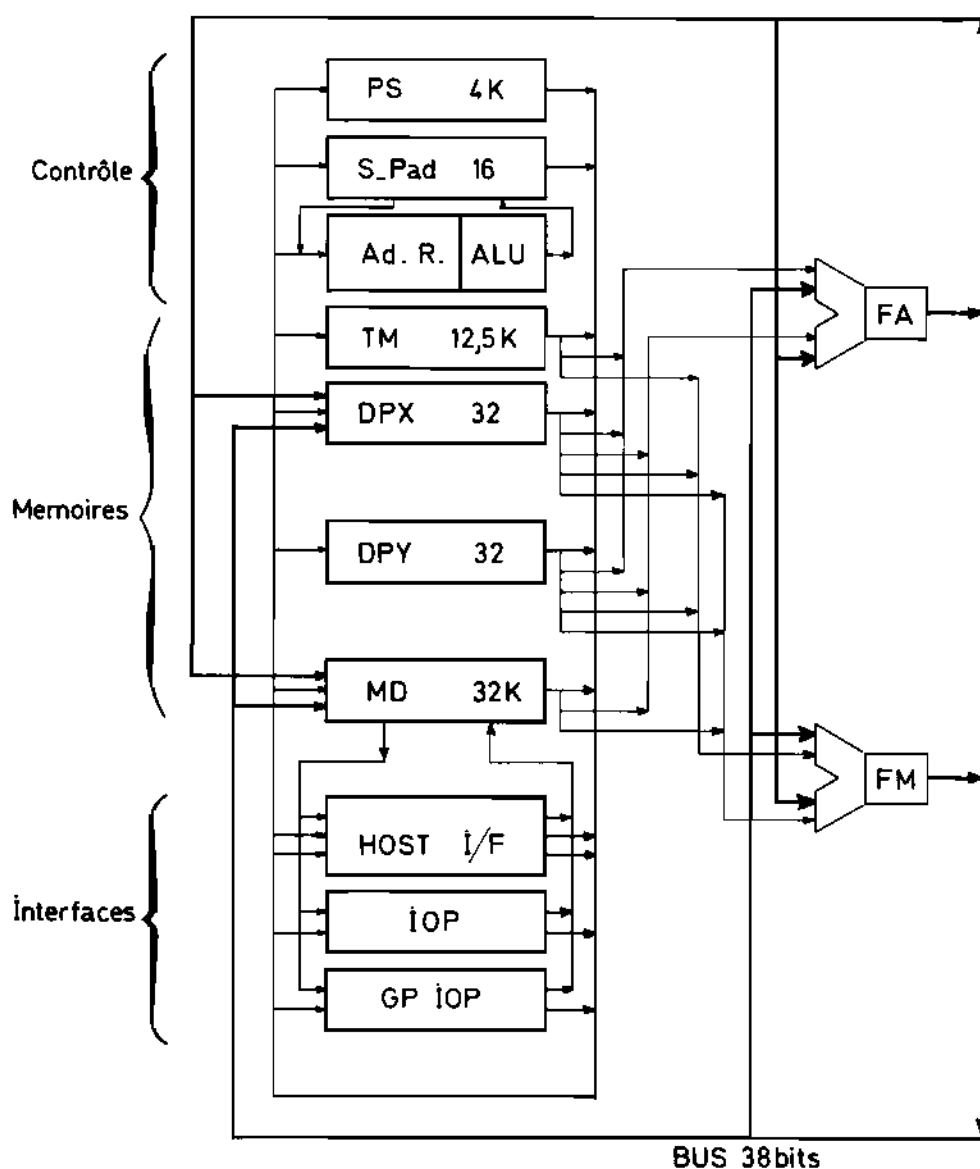
Processeur vectoriel
FPS100

VISUAL

Visualisation de
l'image simulée

Console de traitement
d'image Péricolor 2000

31

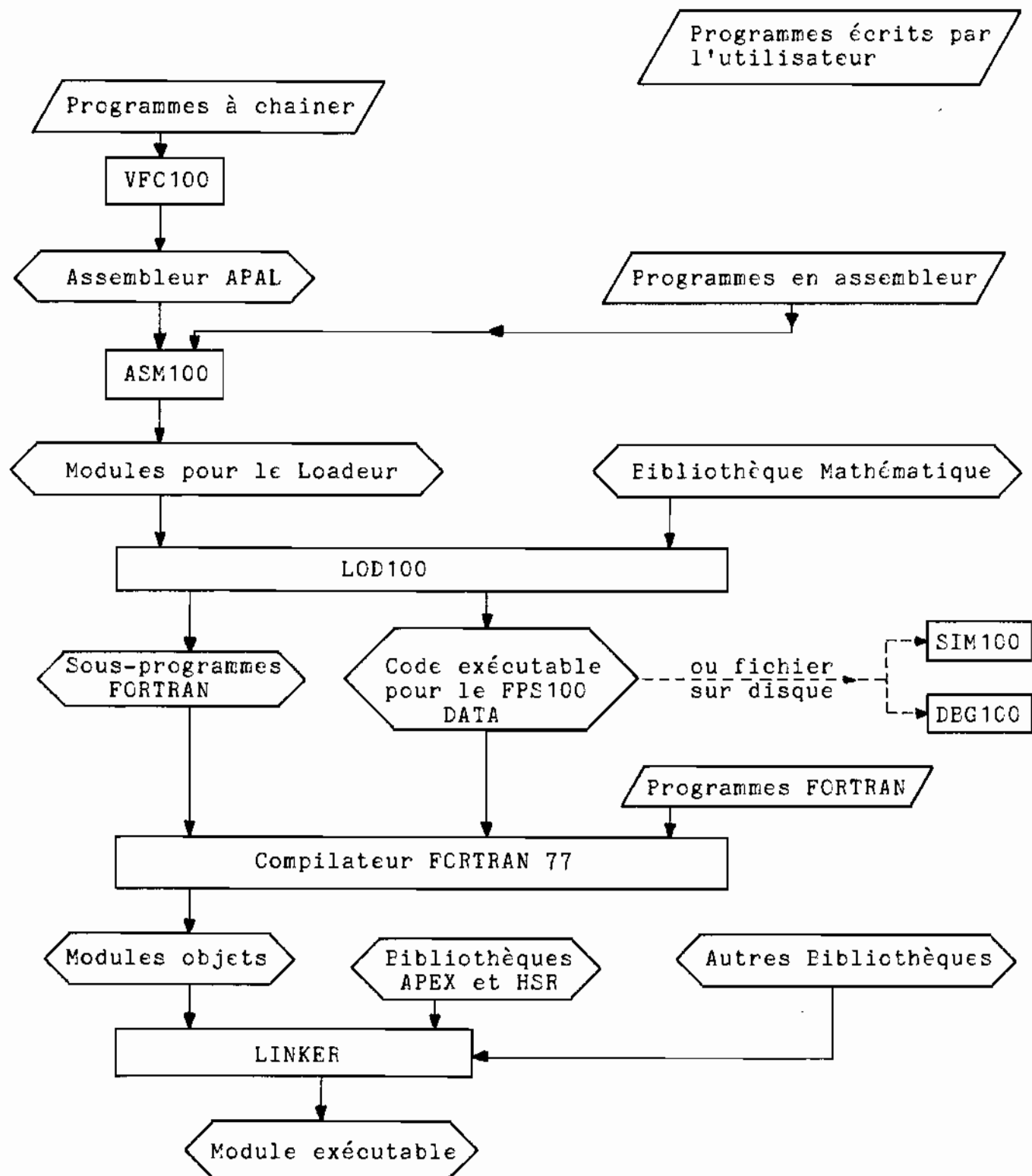


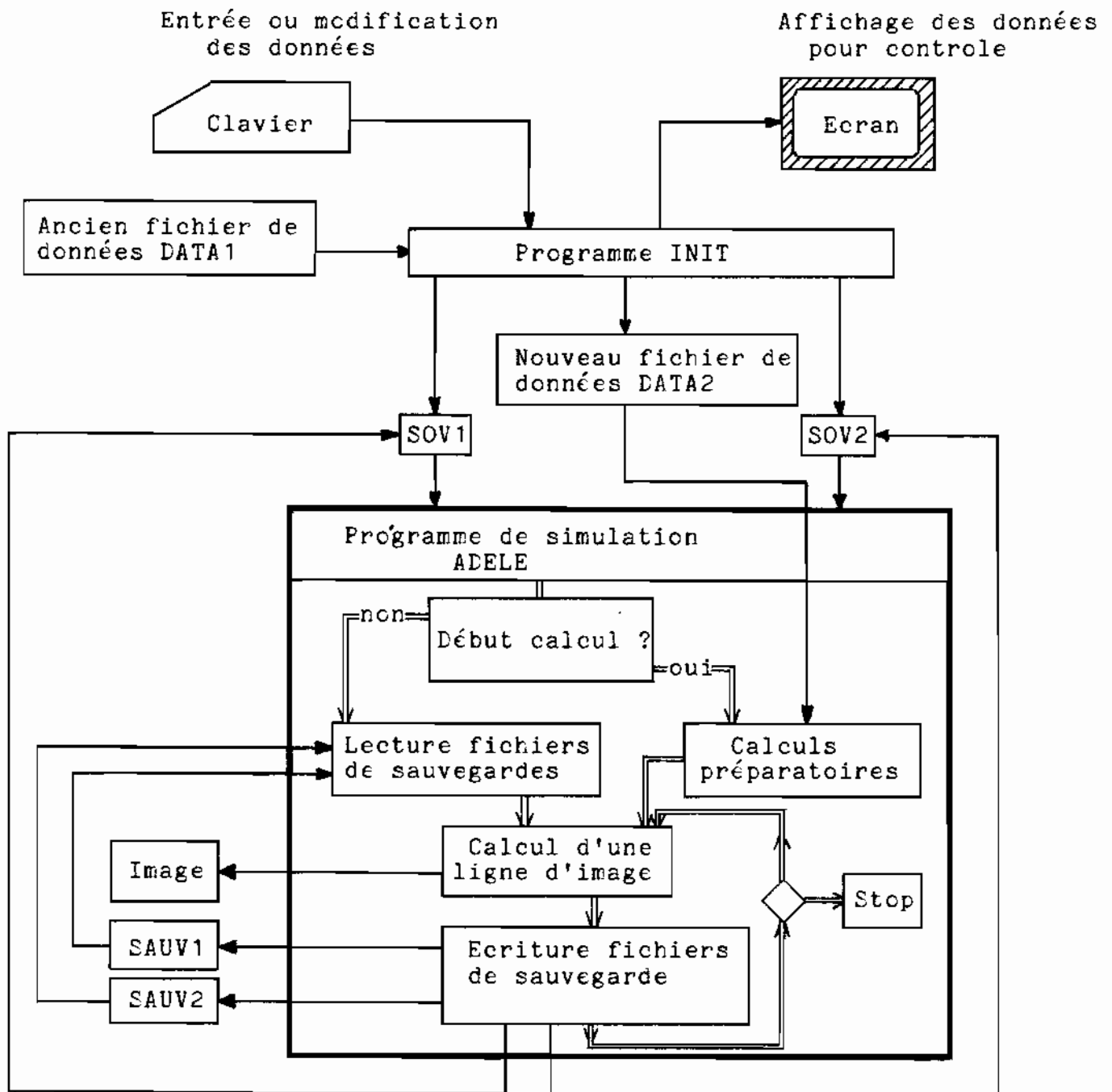
32

```

PARAMETER (IDIMT=8192,IDIM=50)
REAL      TAB(IDIMT),MAT(IDIM,IDIM),MAT2(IDIM,IDIM)
.
.
IATAB=1
IAMAT=IATAB+IDIMT
IDIM2=IDIM*IDIM
IAMAT2=IAMAT+IDIM2
.
.
CALL APINIT(0,1,ISTAT)
IF(ISTAT.NE.1) STOP 'FPS100 NON DISPONIBLE'
.
.
CALL APPUT(TAB,IATAB,IDIMT,2)
CALL APPUT(MAT,IAMAT,IDIM2,2)
.
.
CALL APWD
CALL RFFT(IATAB,IDIMT,1)
CALL MATINV(IAMAT,IDIM)
.
.
CALL APWR
CALL APGET(TAB,IATAB,IDIMT,2)
CALL APGET(MAT2,IAMAT2,IDIM2,2)
CALL APWD
.
.
CALL APRLSE
.
.
STOP

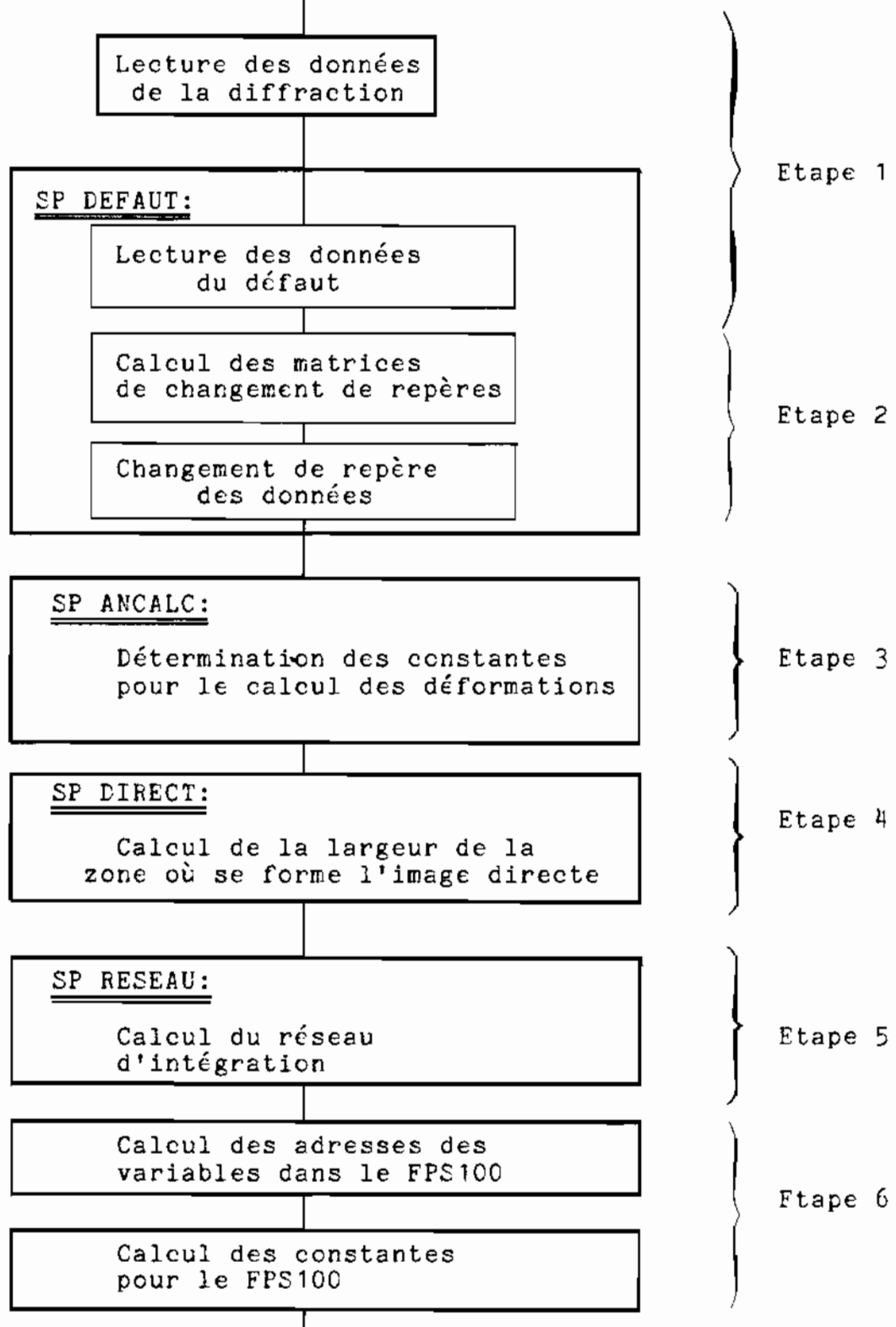
```



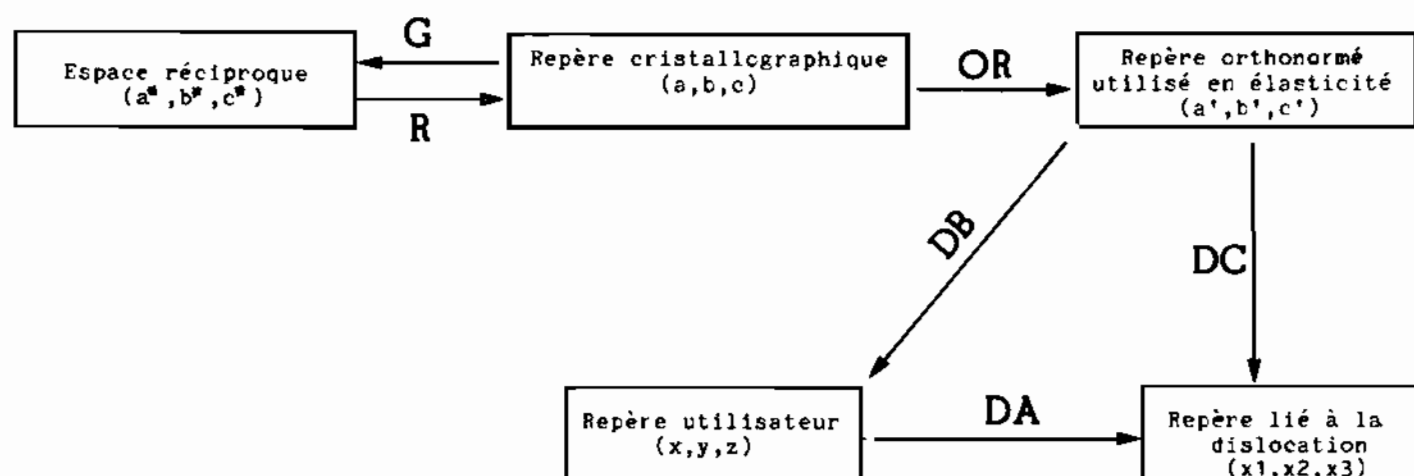


CALCULS PREPARATOIRES

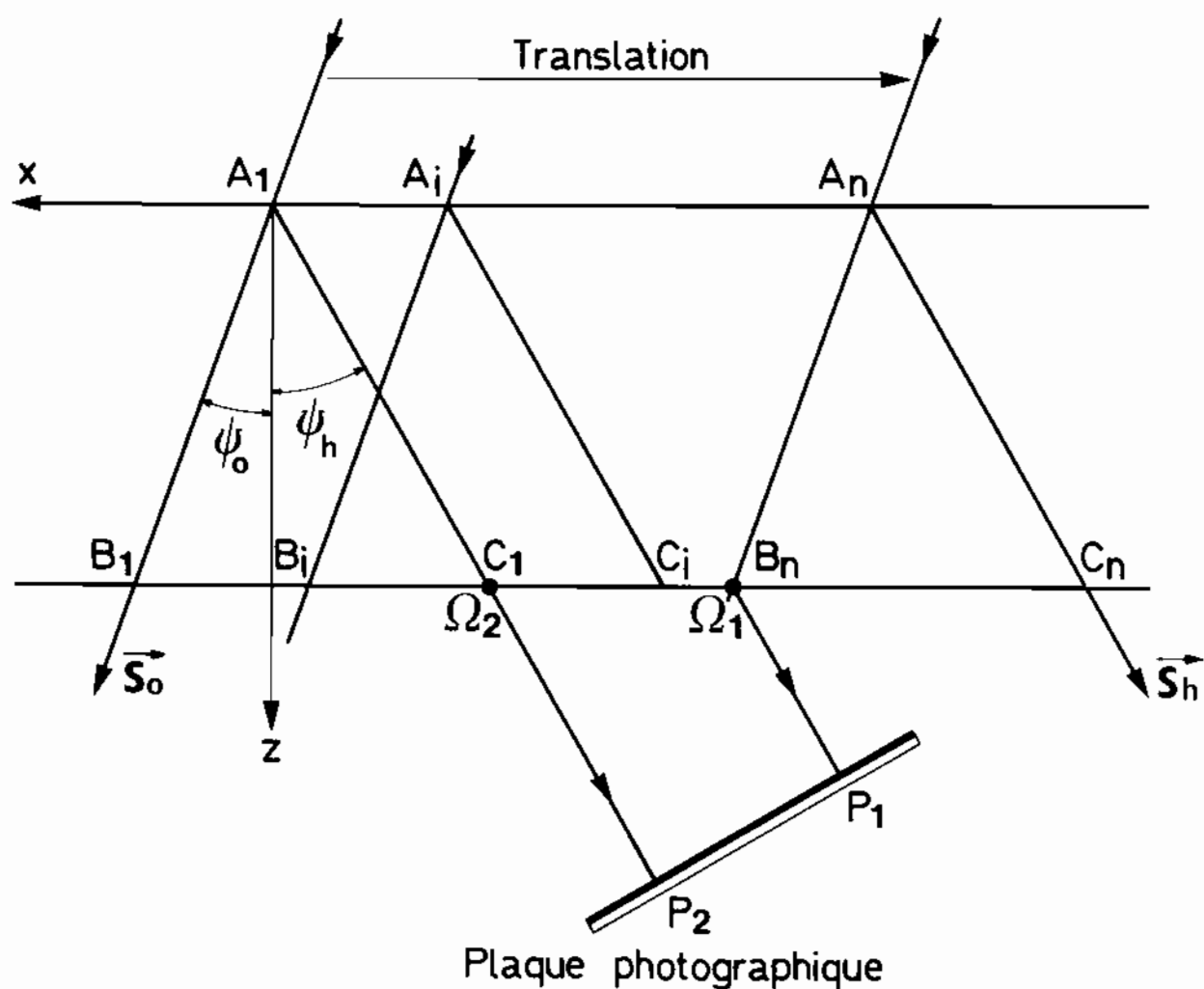
(SP = sous-programme)



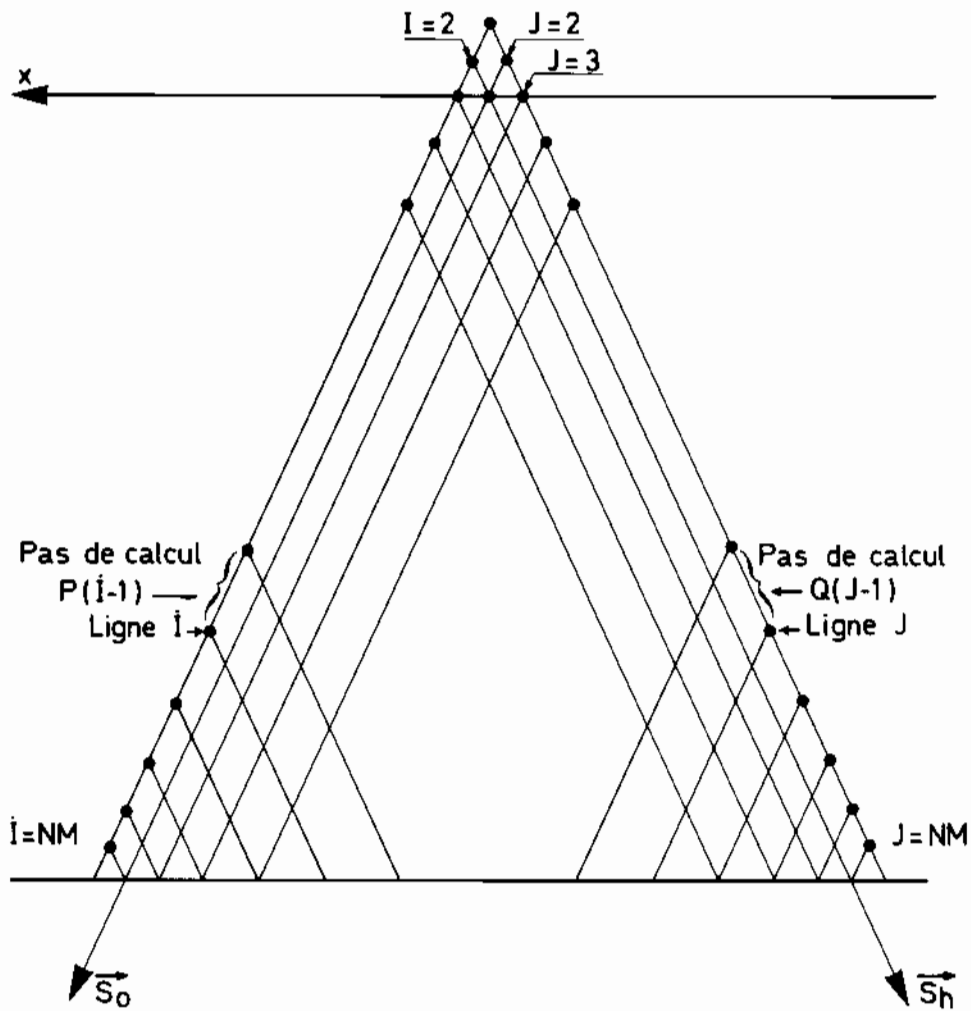
Différents repères utilisés



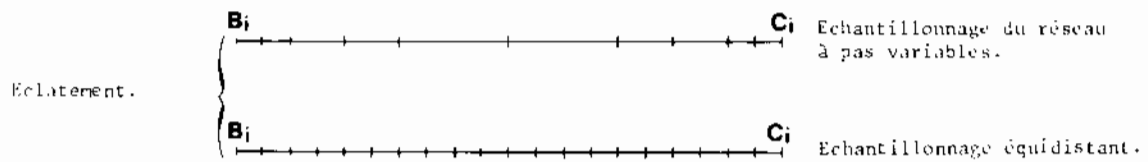
(37)



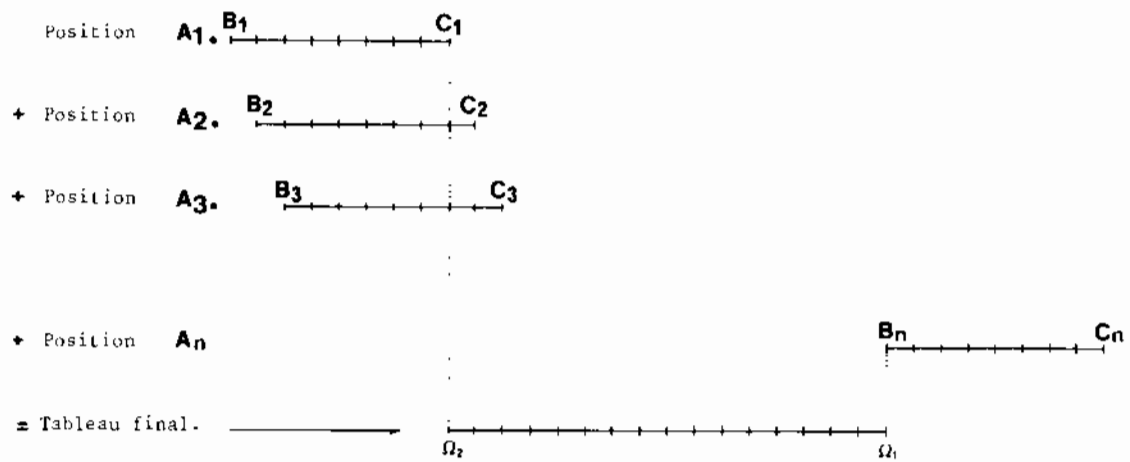
(38)



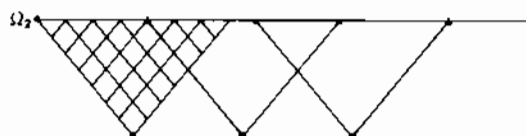
39



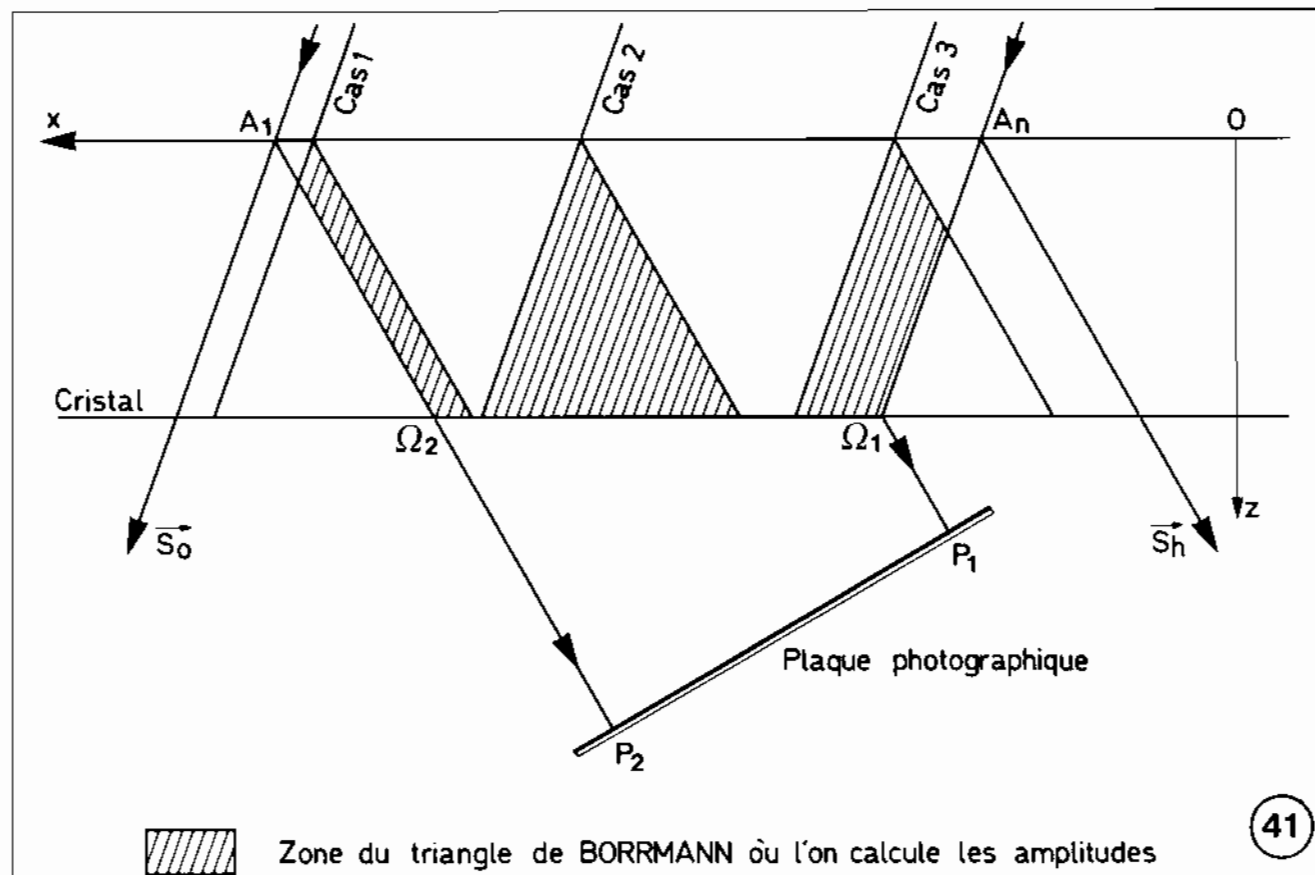
Sommation des résultats éclatés dans le tableau final.



Apodisation du tableau final.

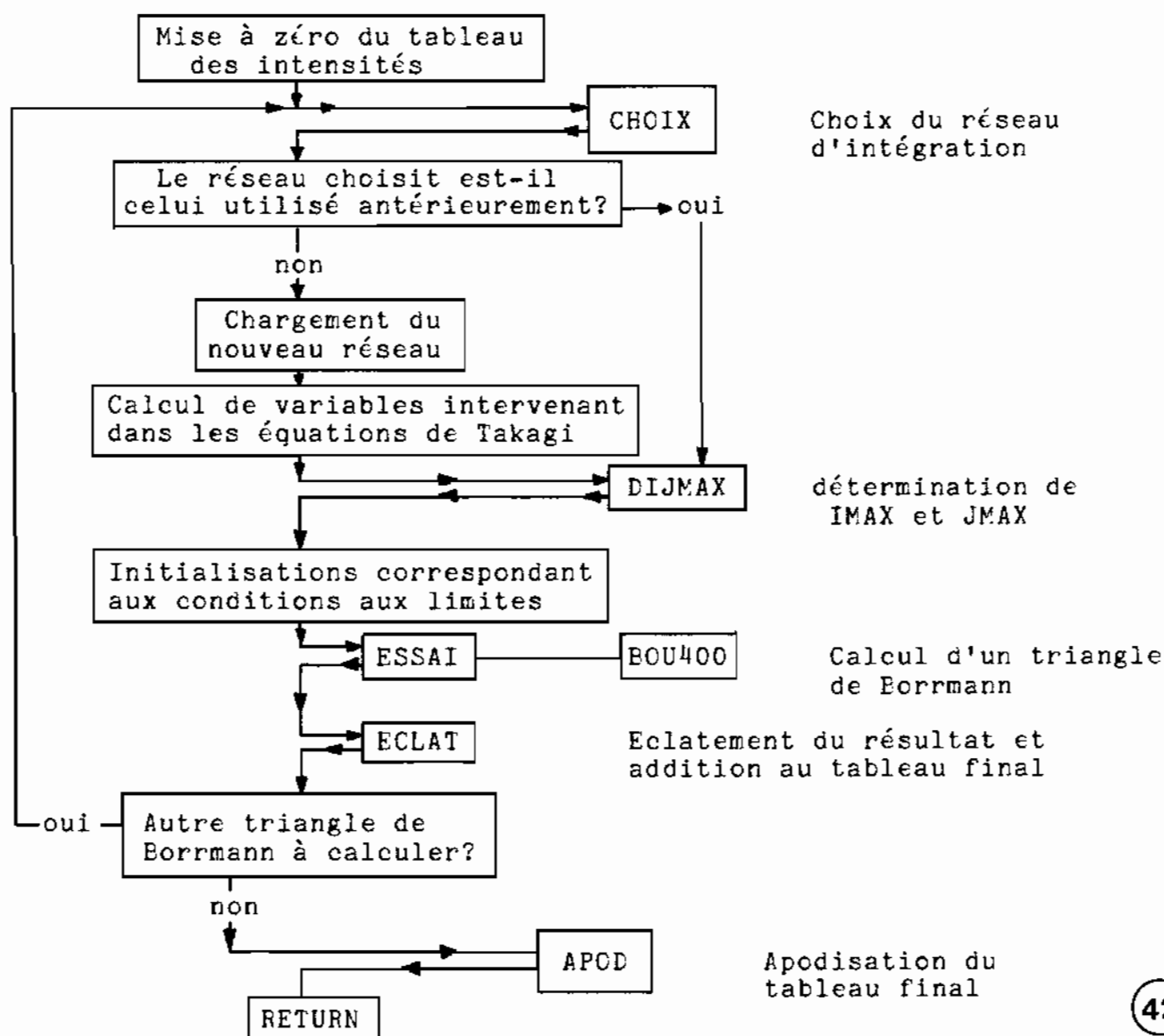


40

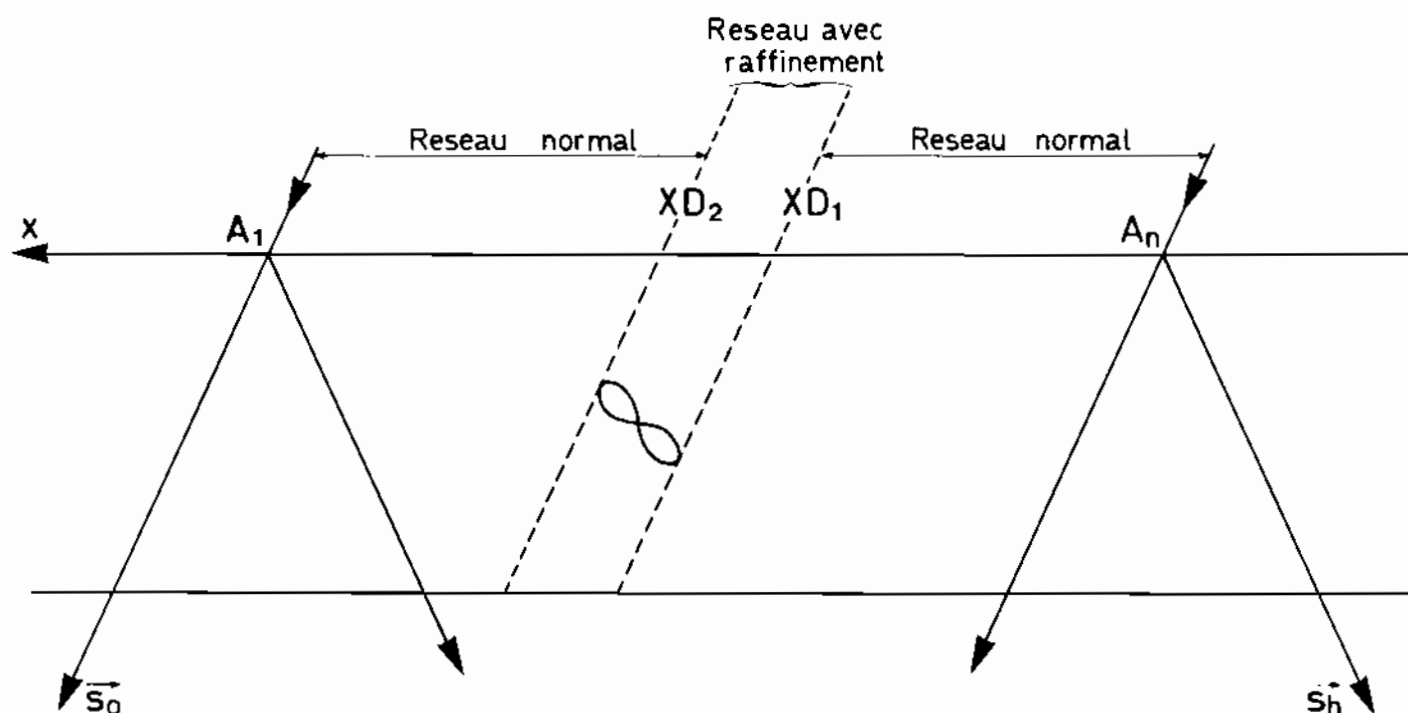


41

Organigramme du sous-programme PL



42



43

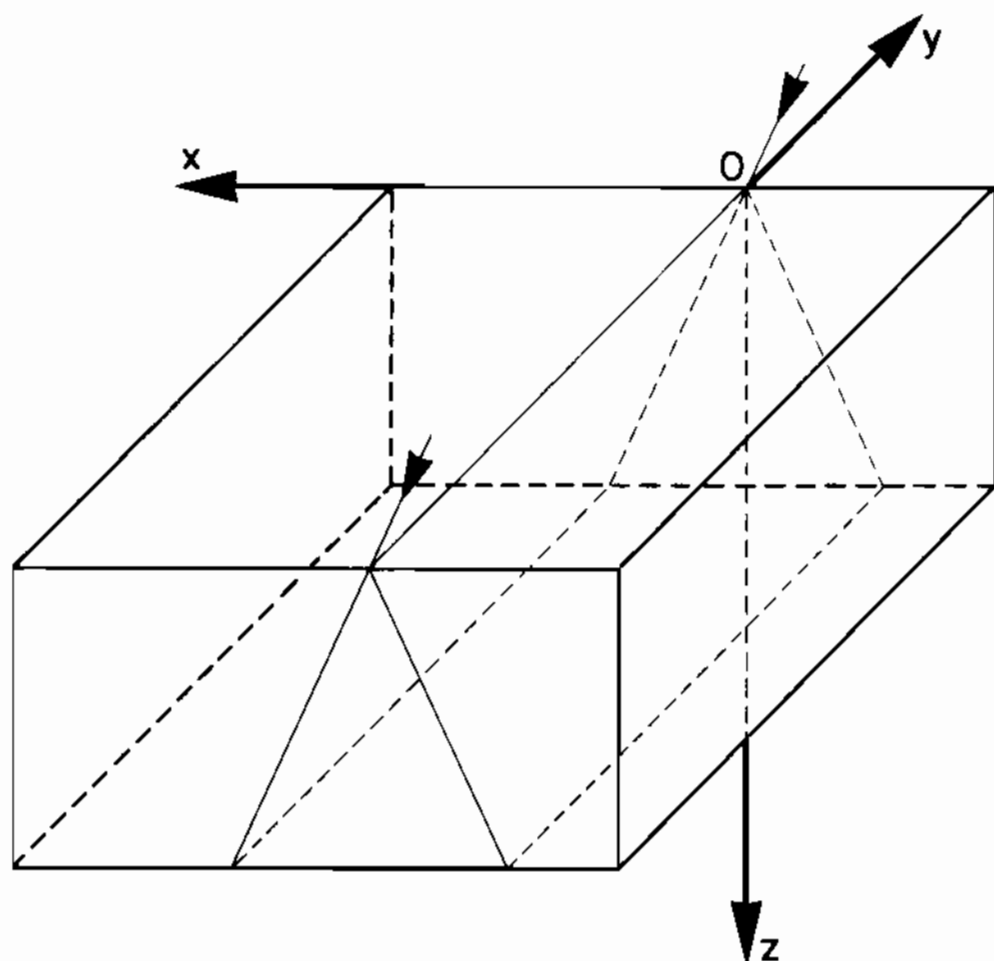
Exemples de temps de calcul d'une ligne d'image
sur différentes machines

crystal de 800 microns d'épaisseur
image de 180 microns de large

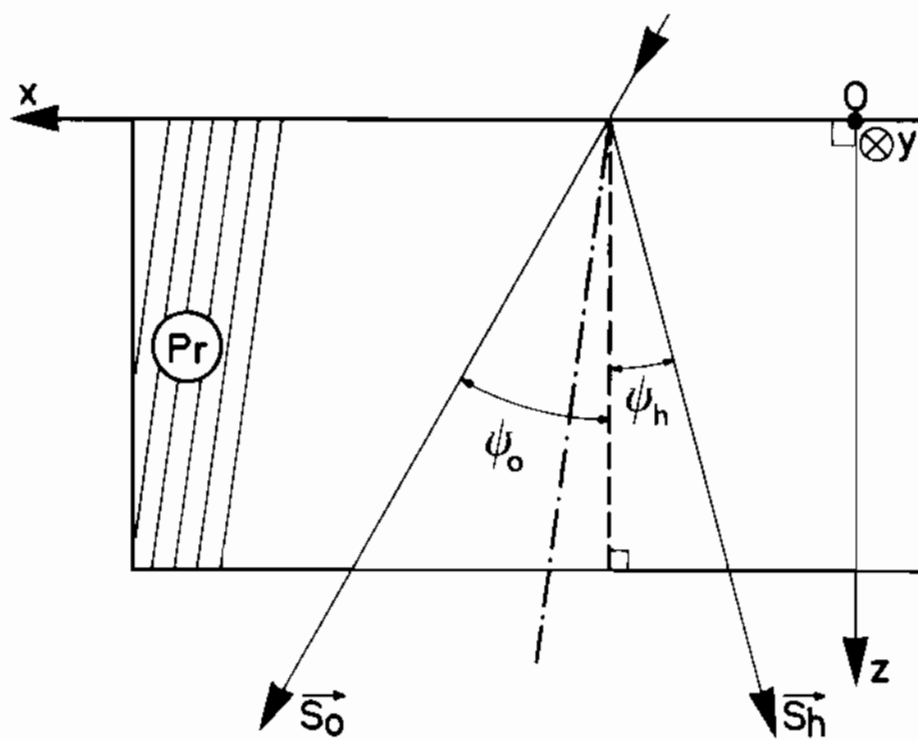
Machine	Centre de calcul	Temps d'exécution	Language
Mini6 BULL	INTER UER 53-63	9 heures (*)	FORTTRAN
Mini6 BULL	INTER UER 53-63	6 heures	FORTTRAN
IBM 370/168	CIRCE	40mn07	FORTTRAN
AMDHAL V7	CIRCE	17mn50	FORTTRAN
Mini6 BULL+FPS100	INTER UER 53-63	13mn	FORTTRAN+APAL
CRAY 1	CISI EDF	3mn46	FORTTRAN

(*) En calculant entièrement les triangles de Porrmann

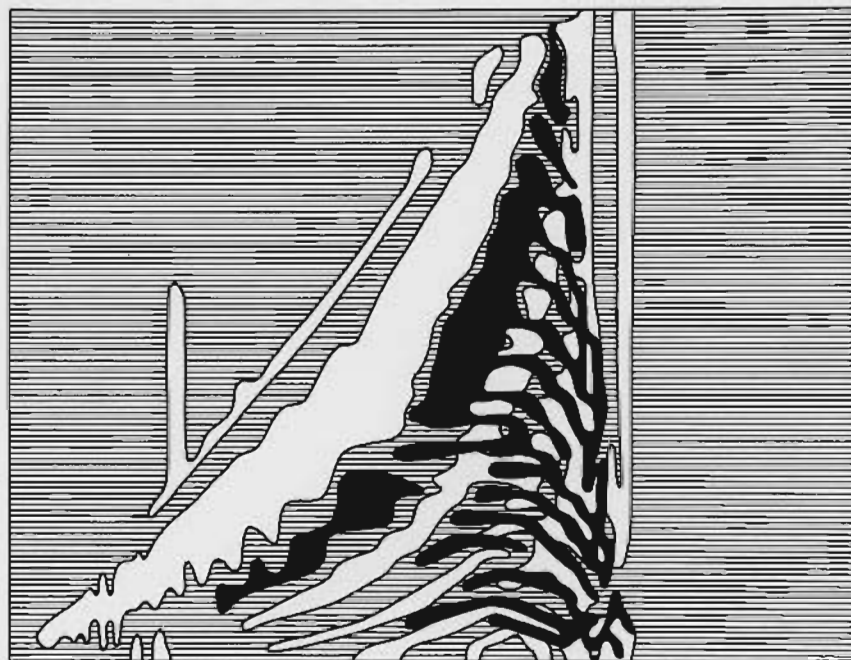
44



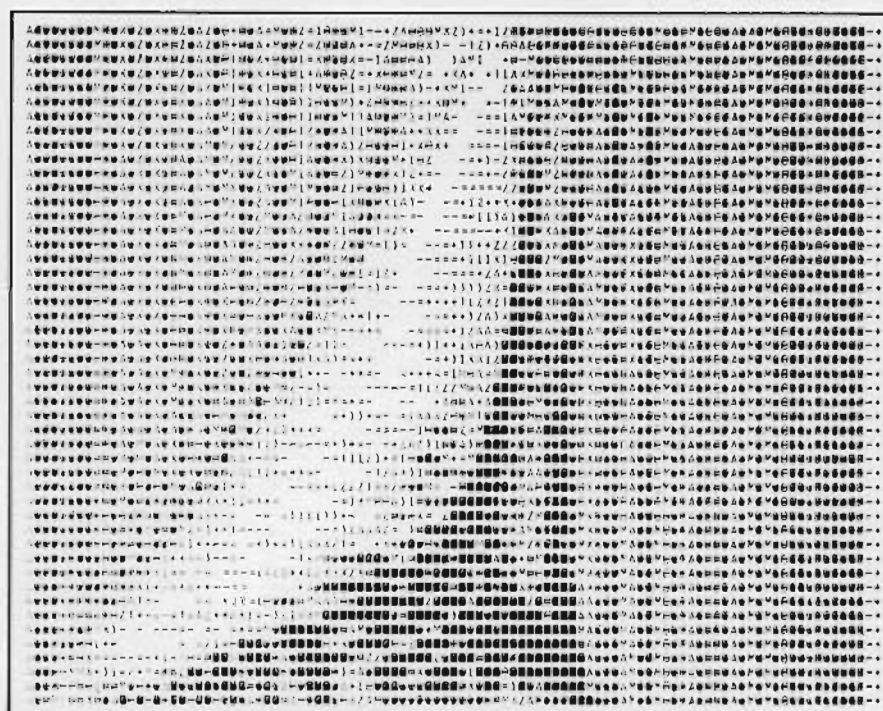
(a)



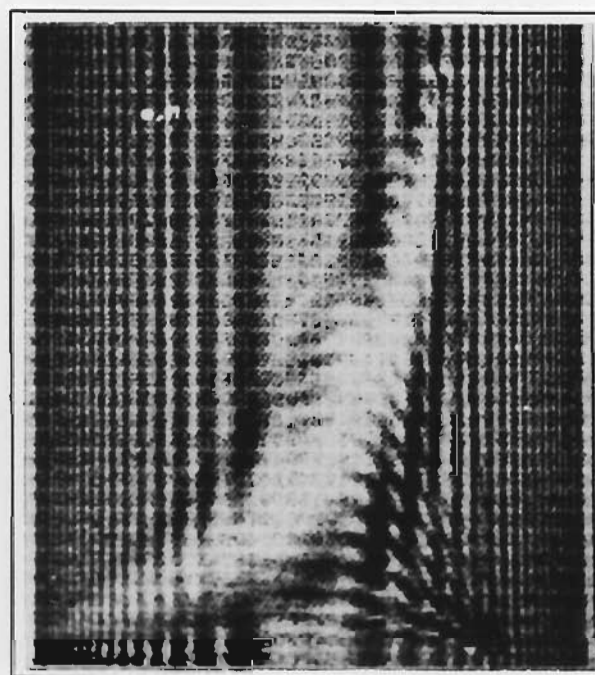
(b)



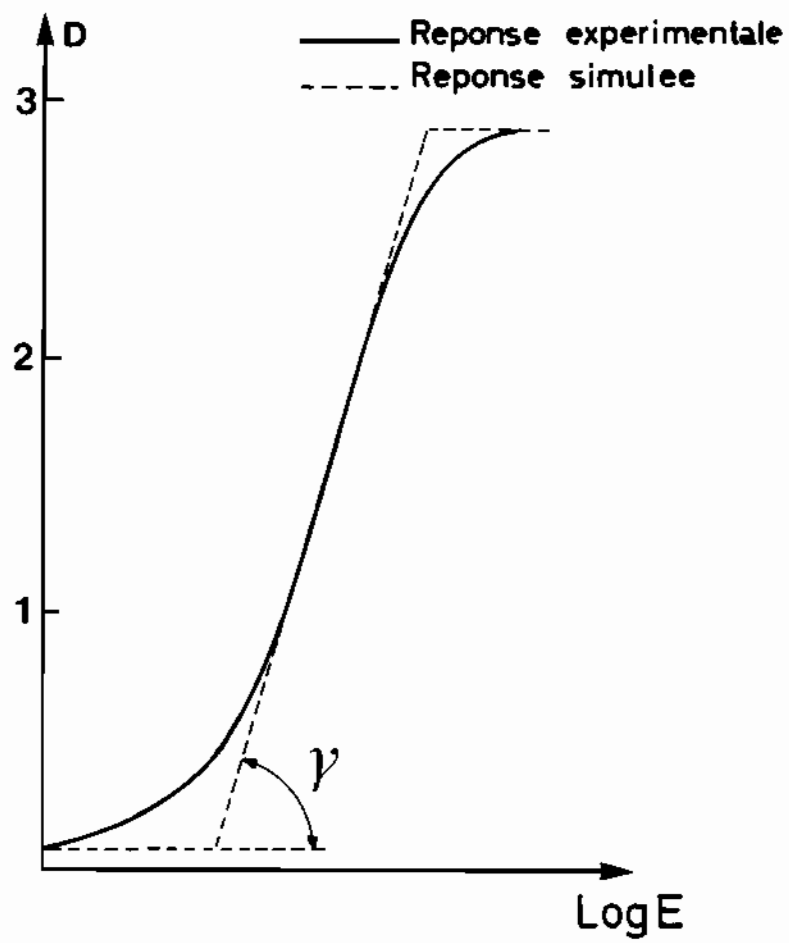
46



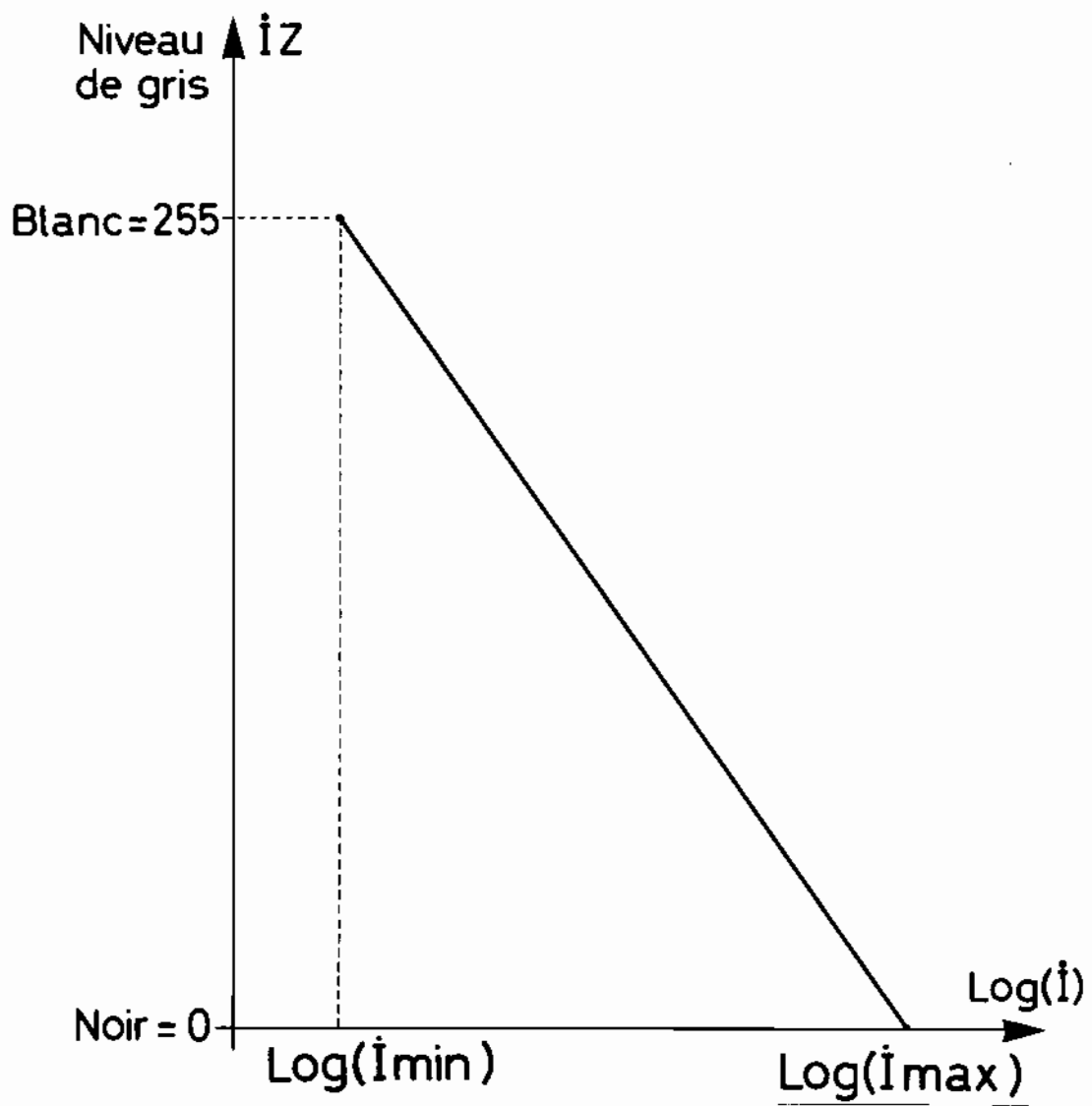
47



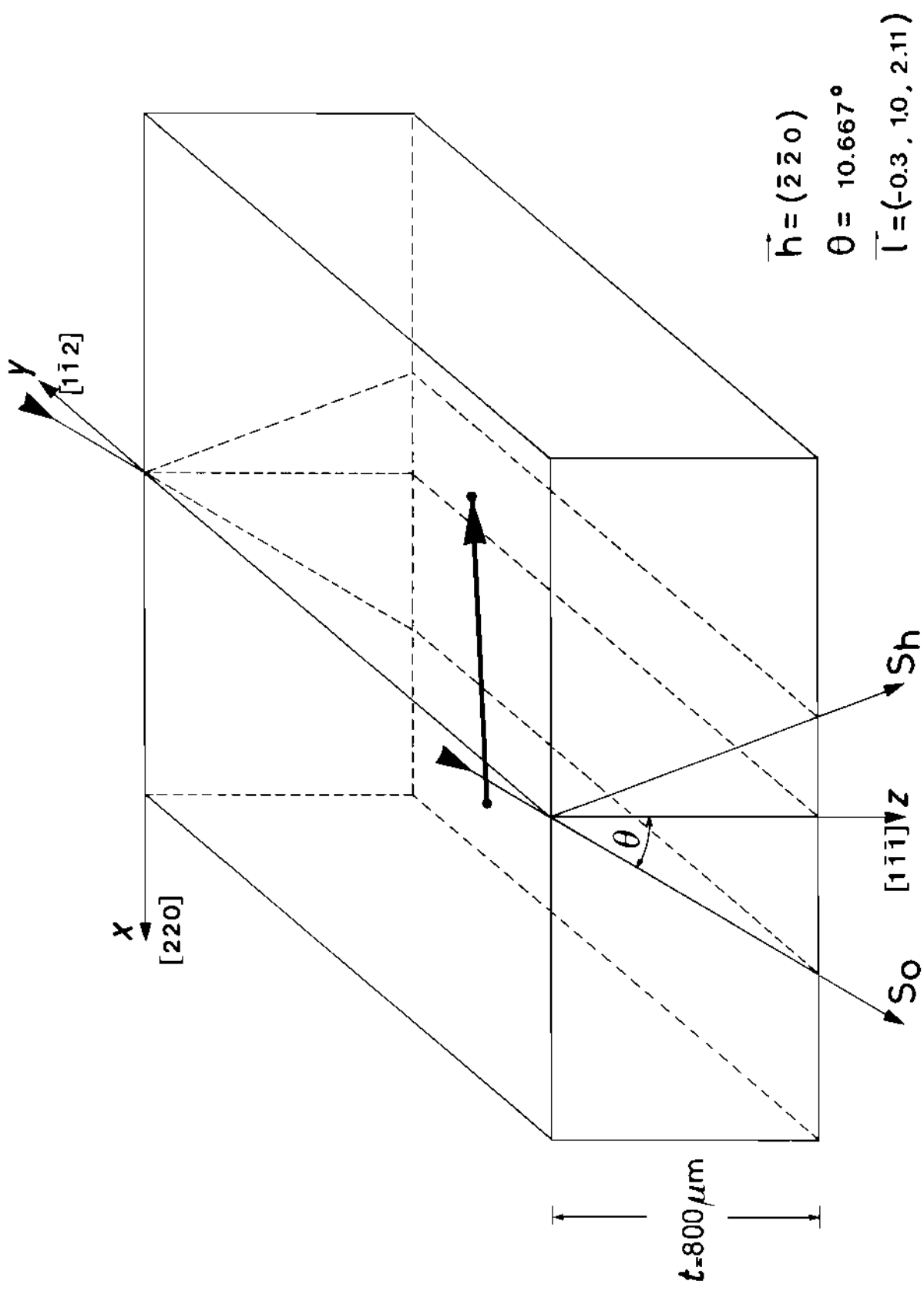
48

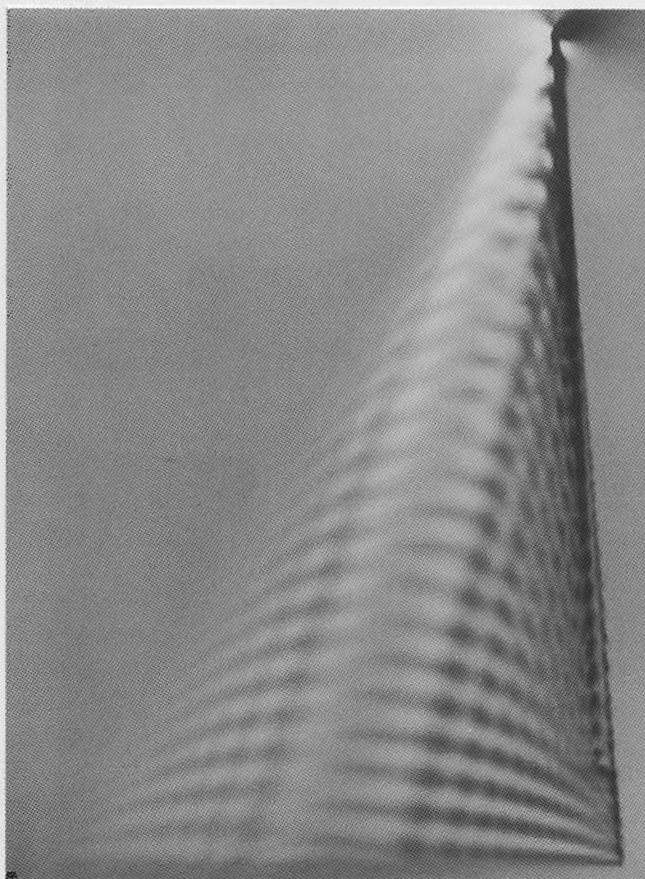


49

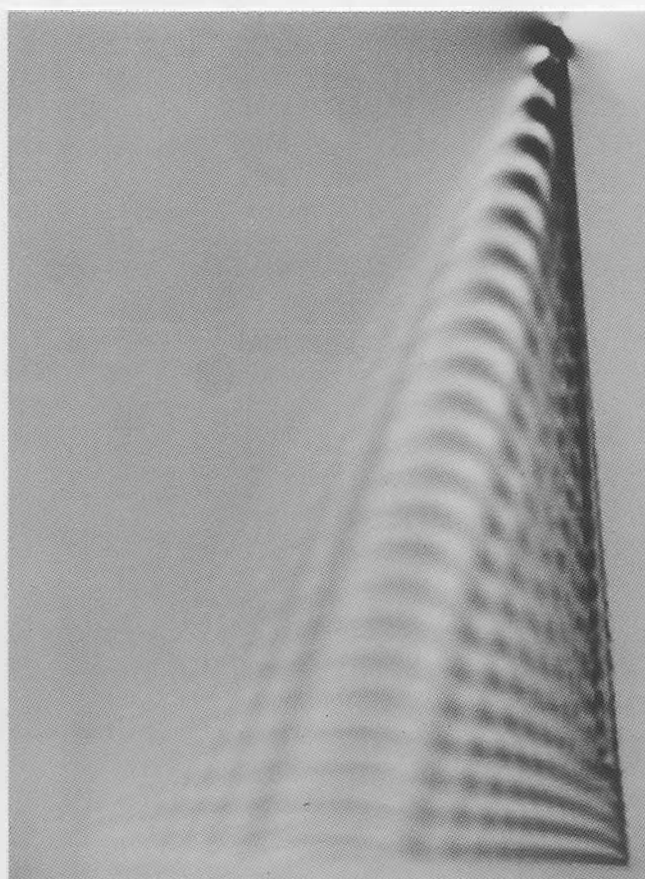


50

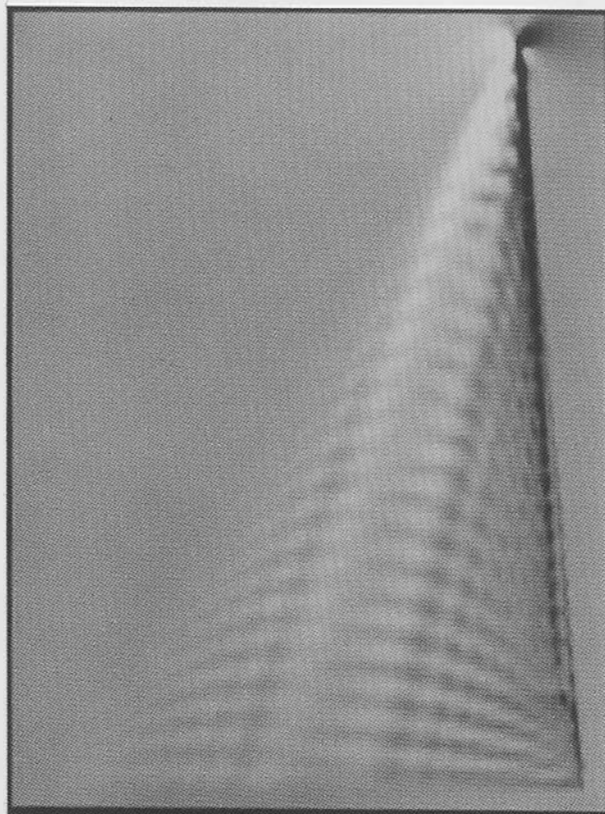




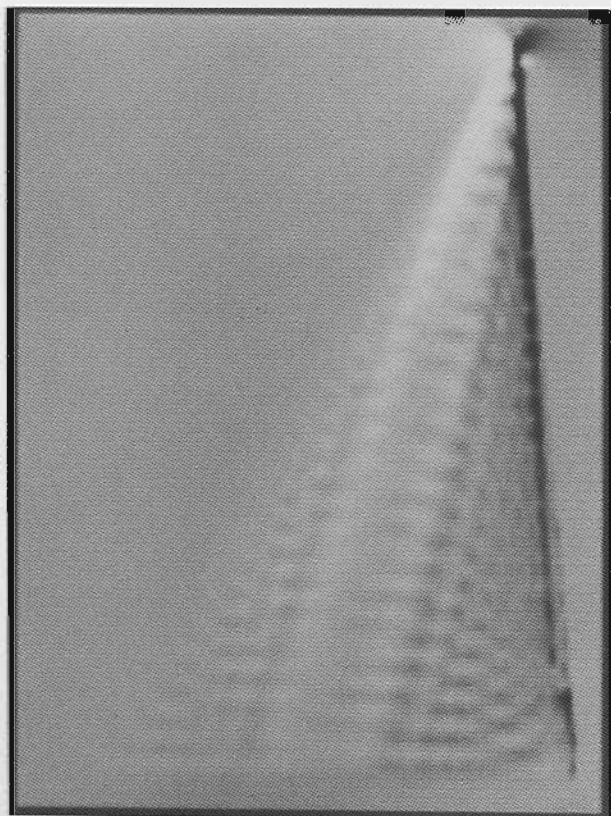
52



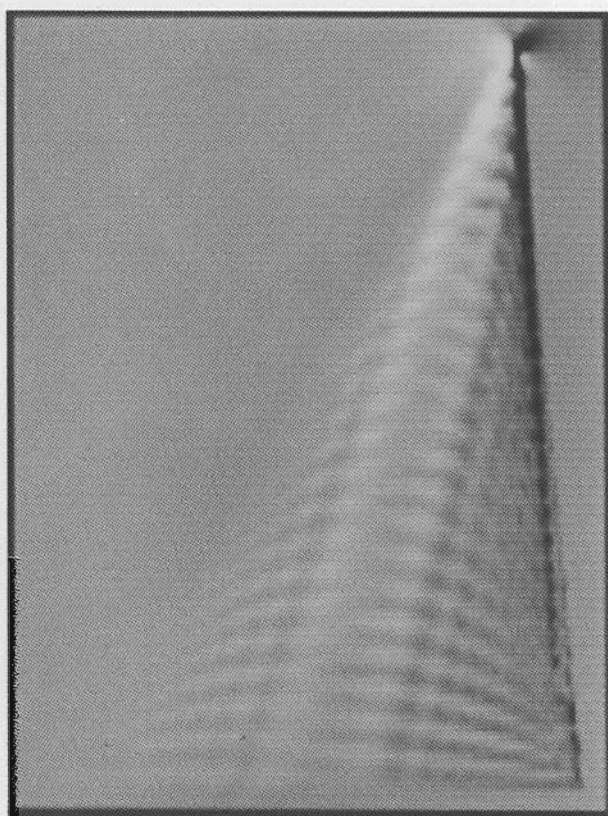
53



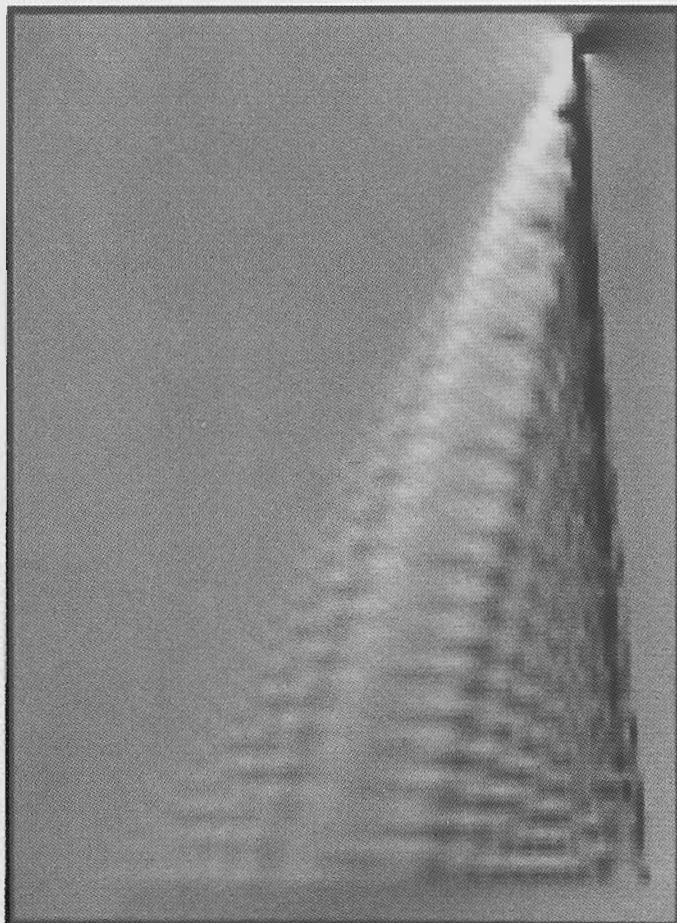
54



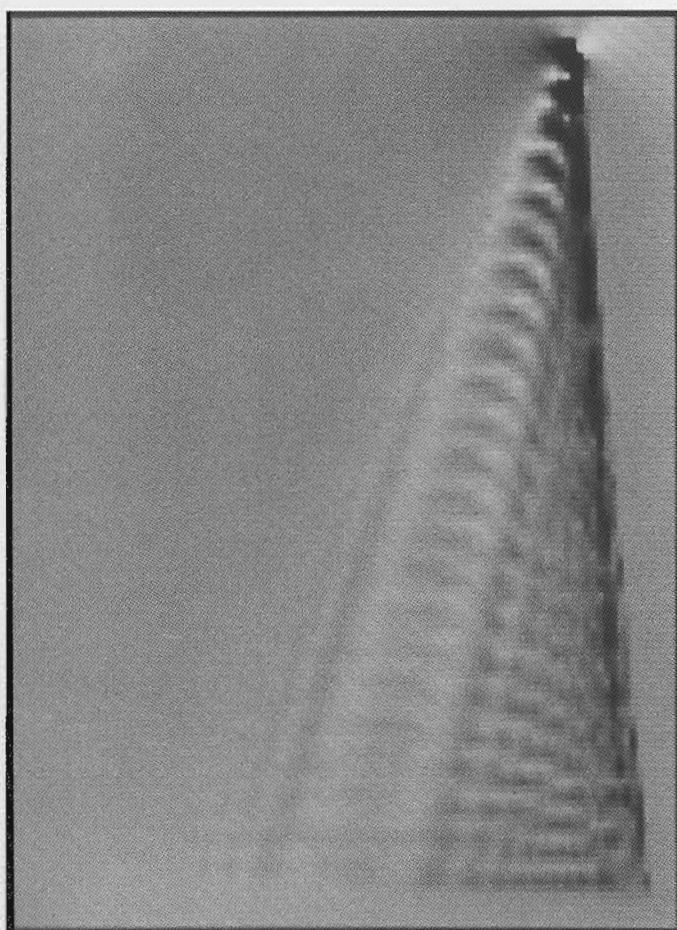
55



56



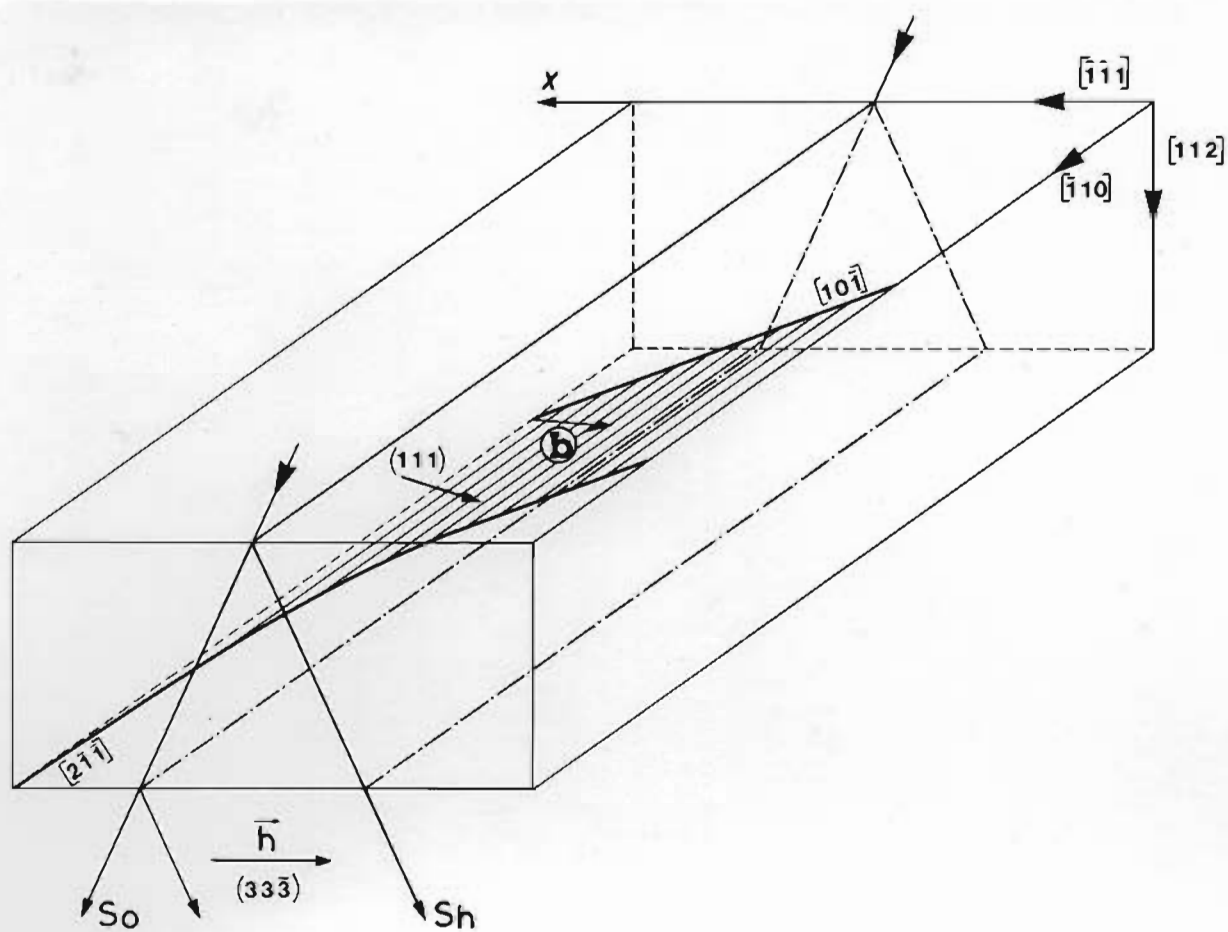
57



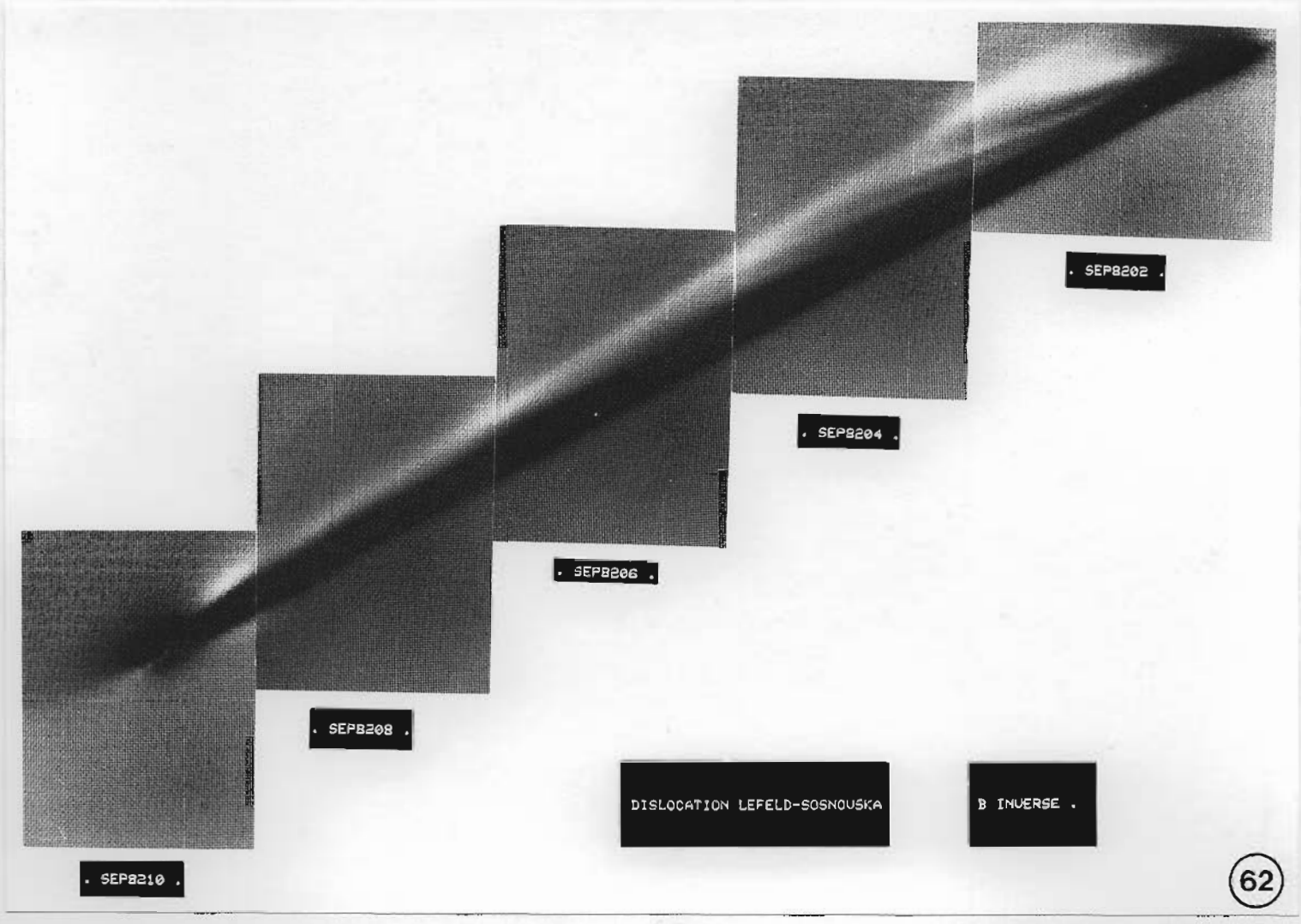
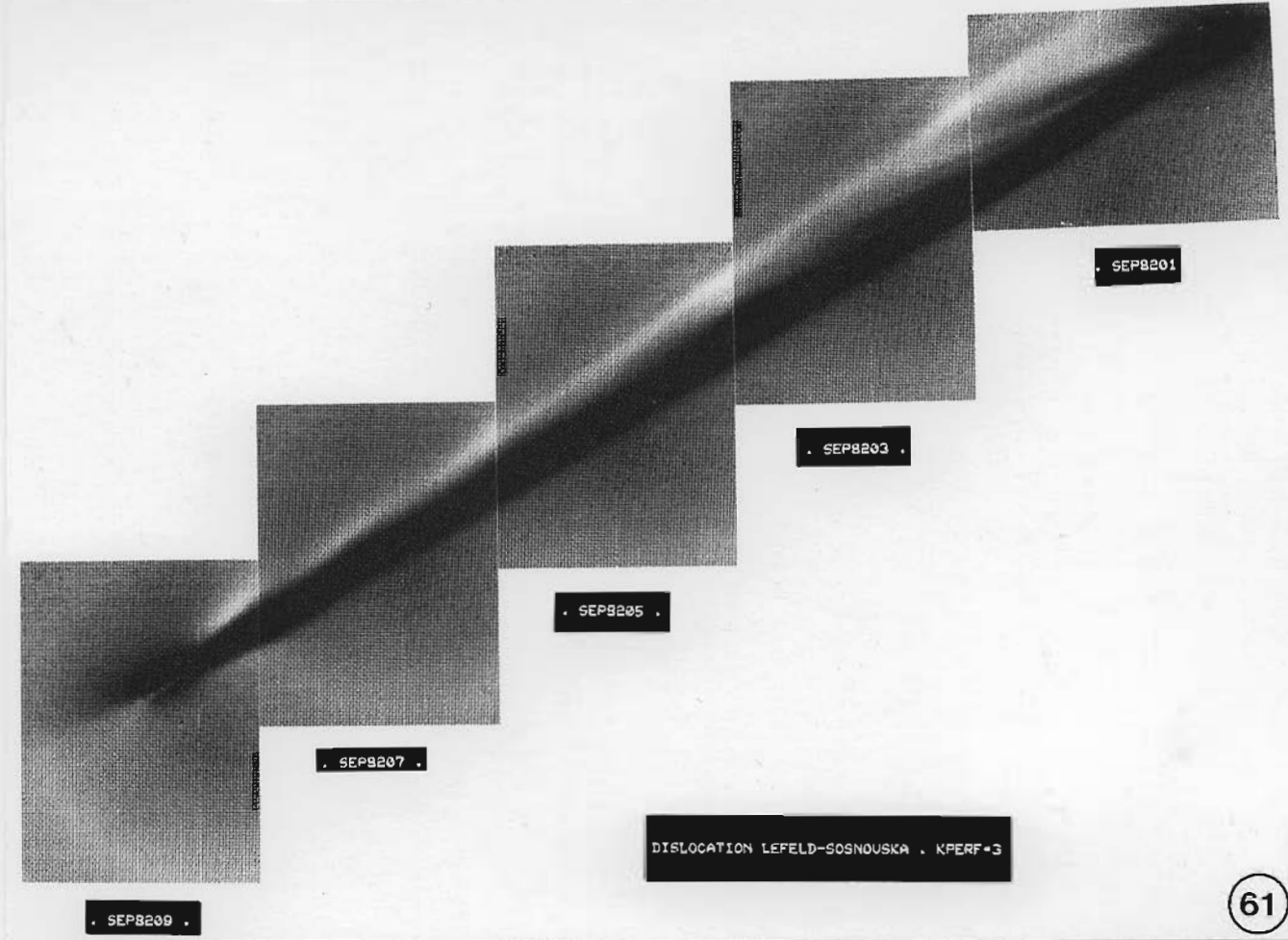
58

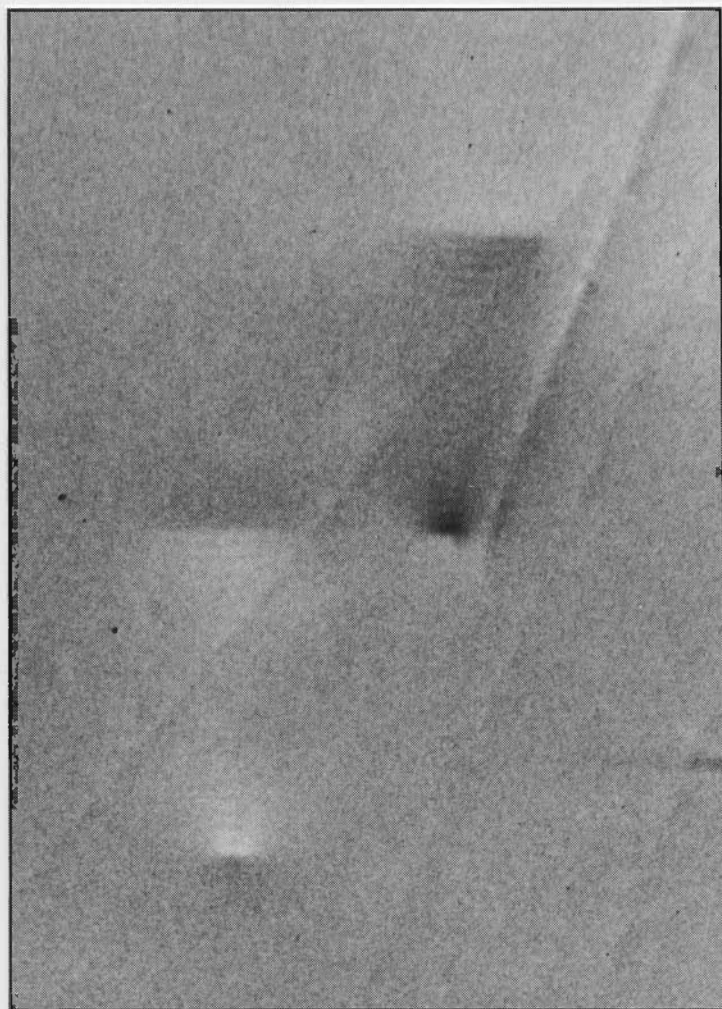


59

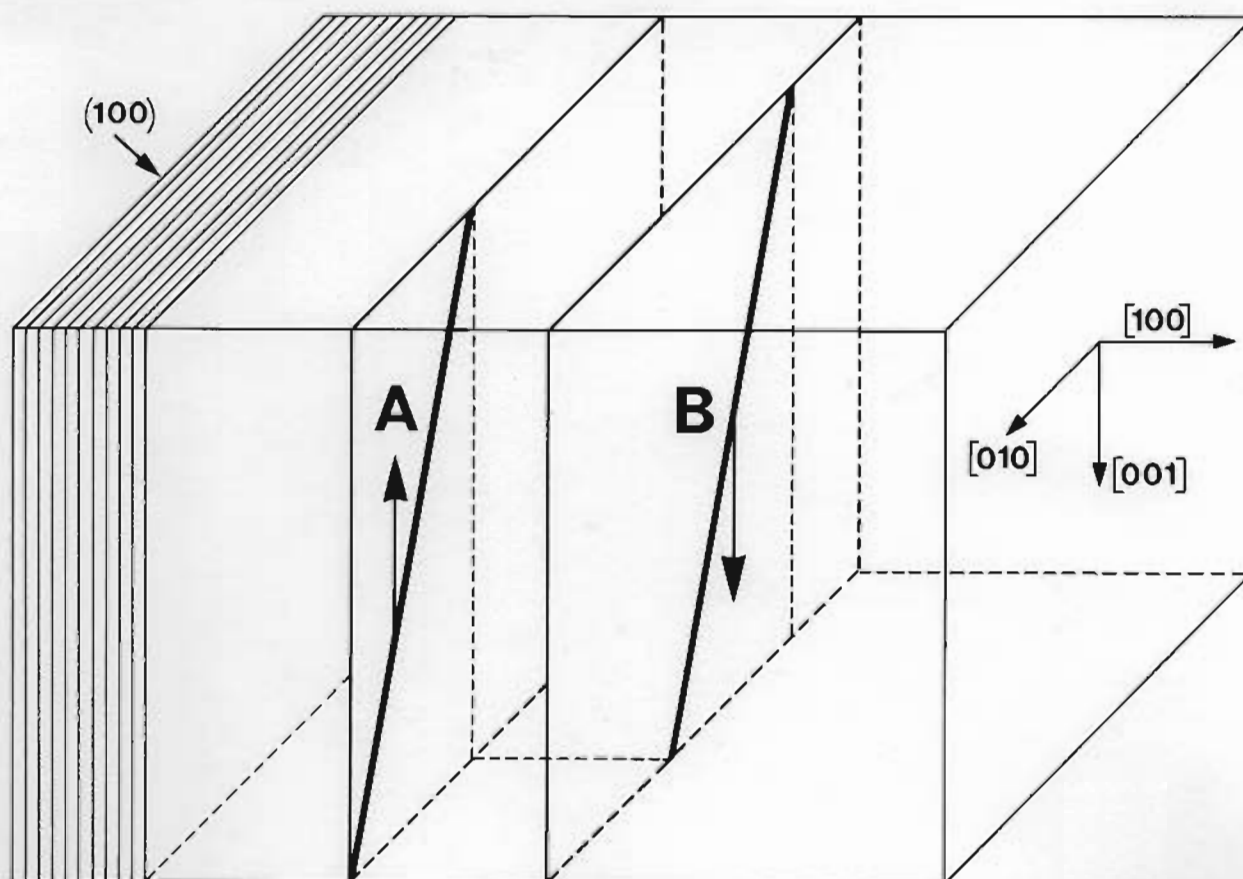


60





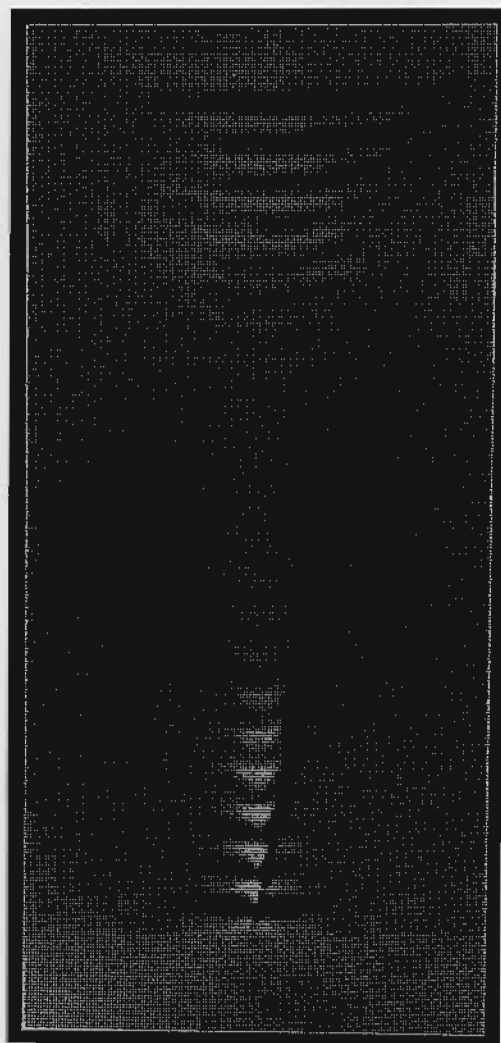
63



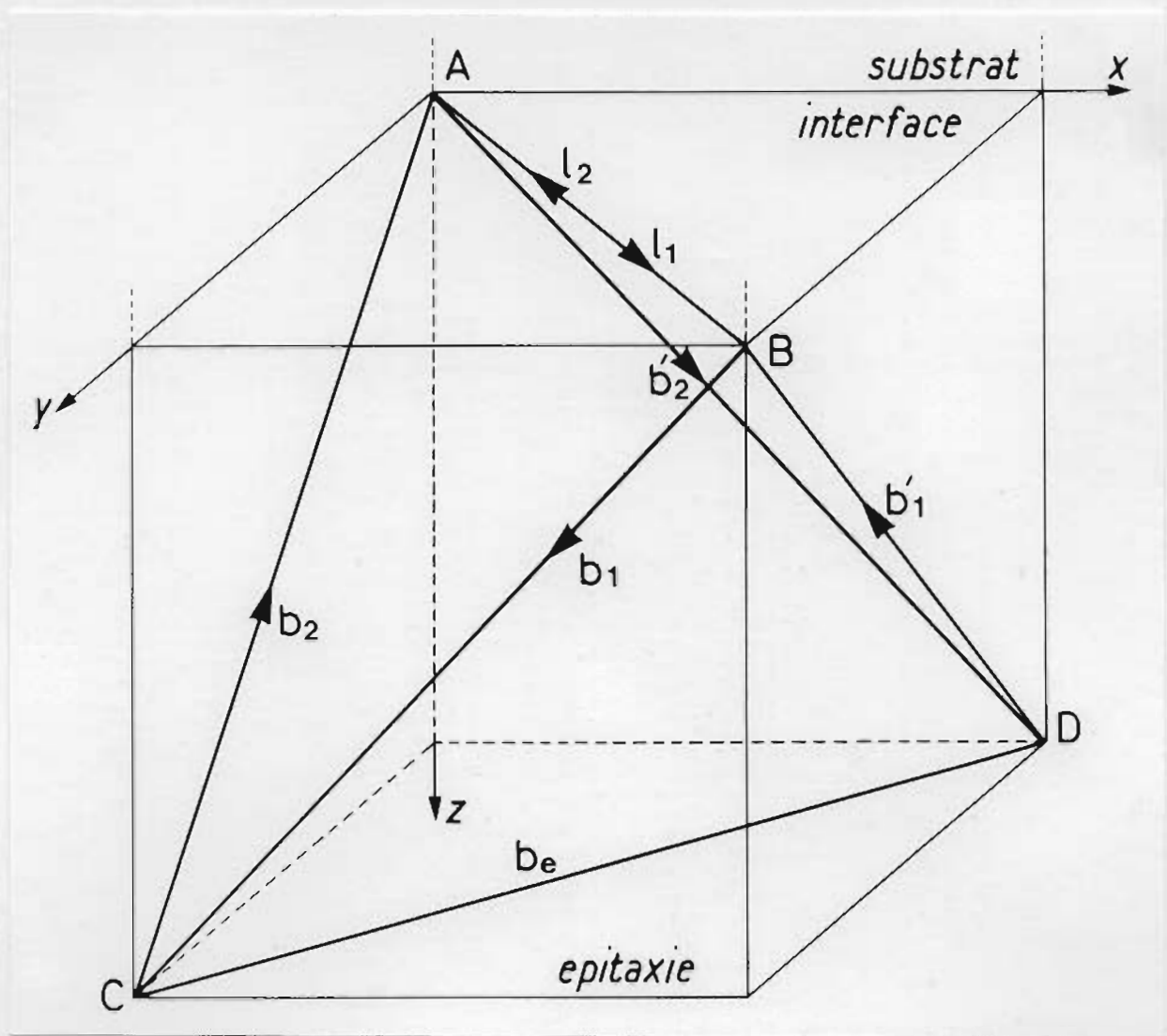
64



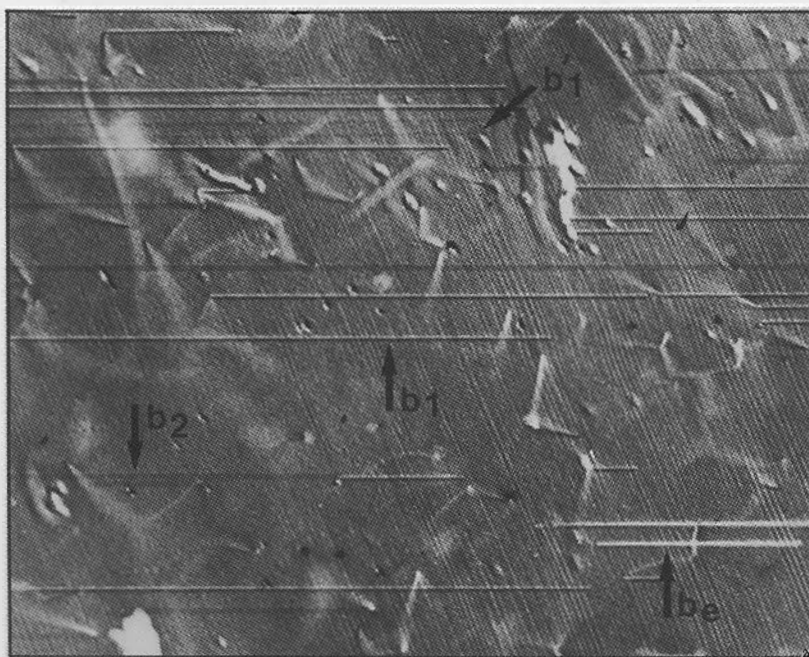
65



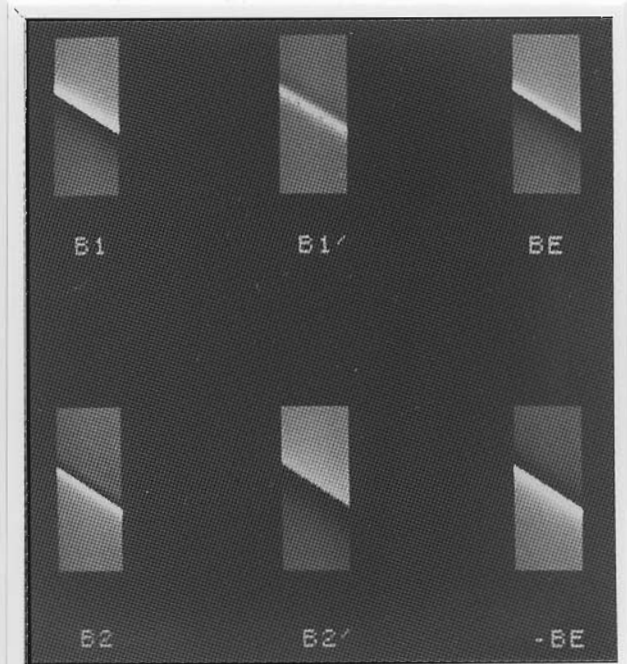
66



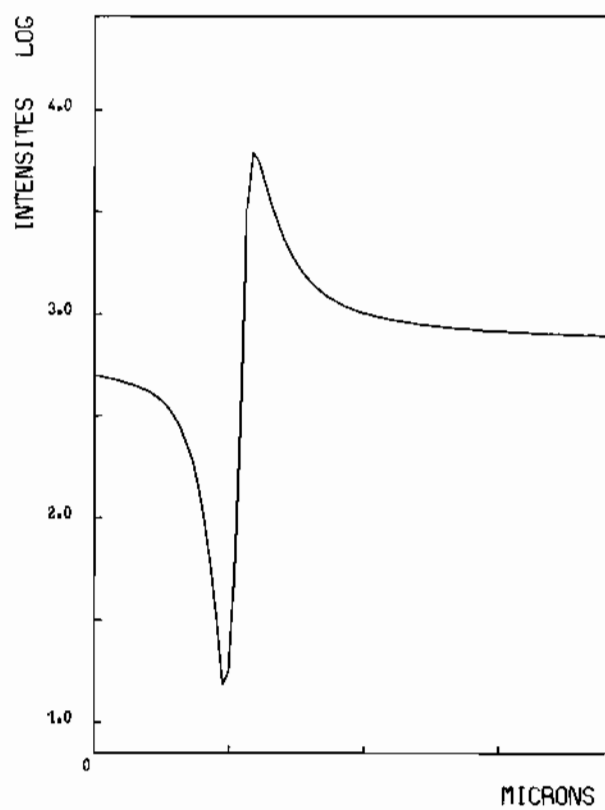
(67)



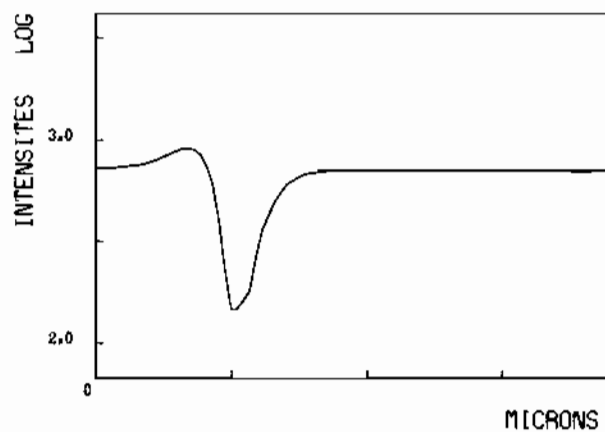
(68)



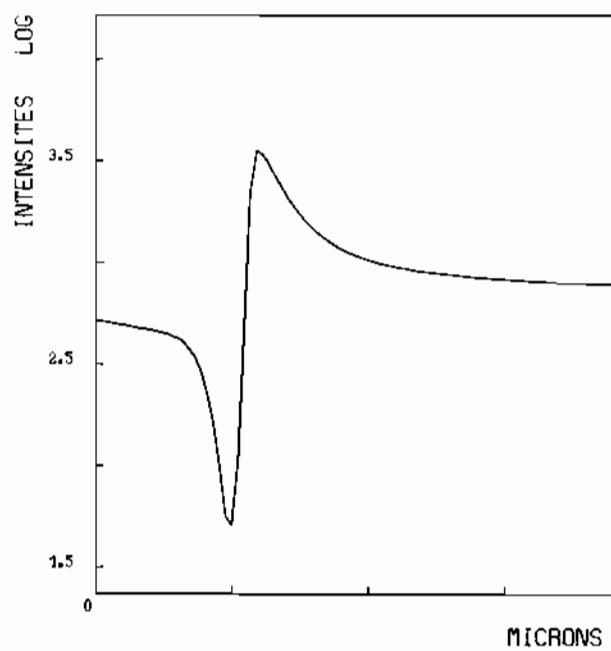
(69)



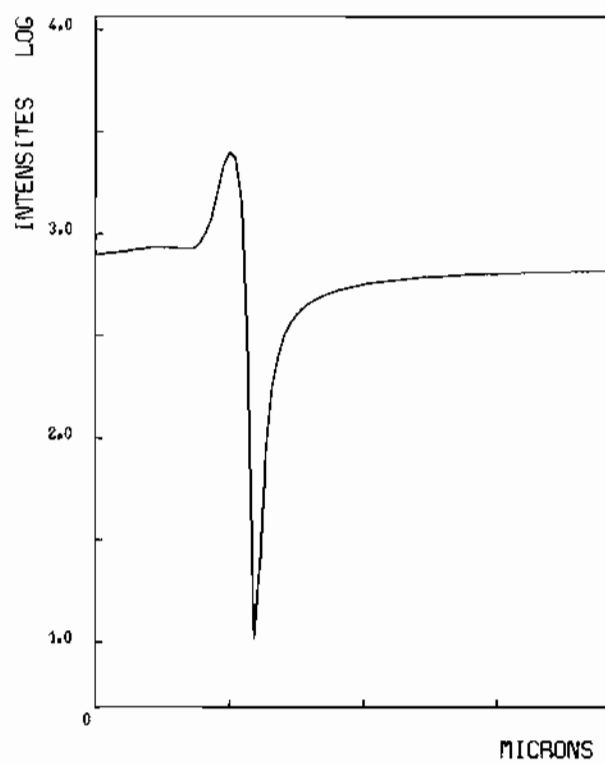
70



71



72



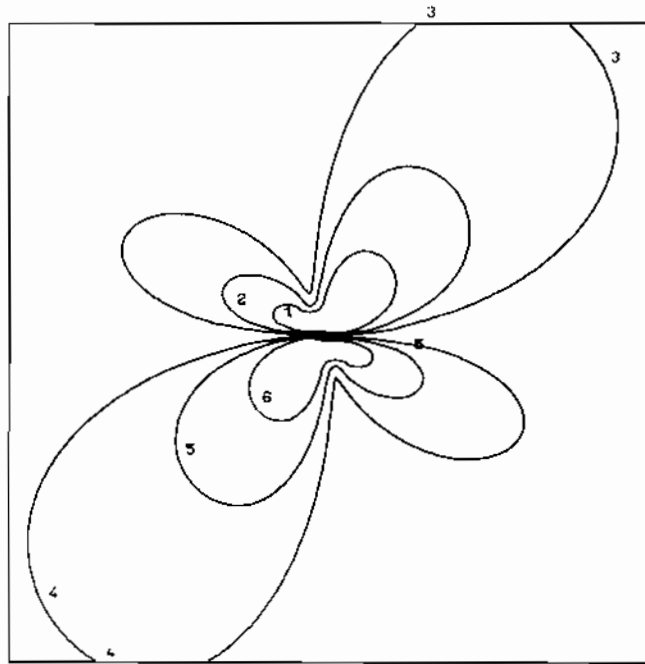
73



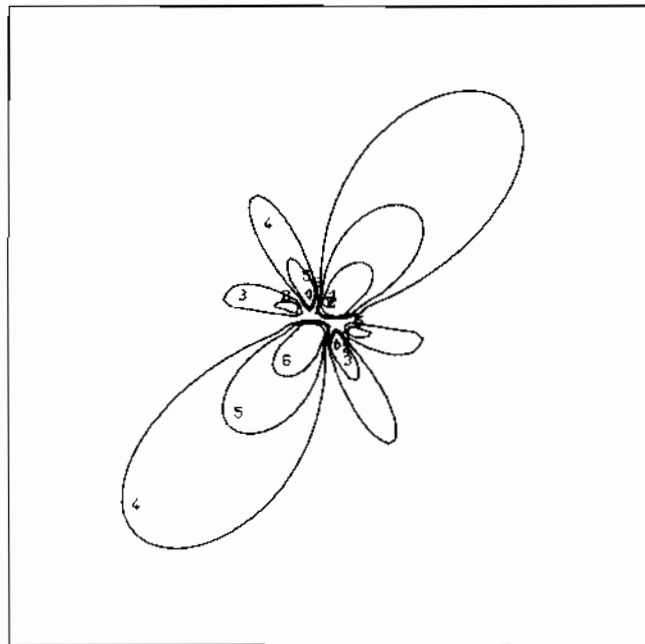
74



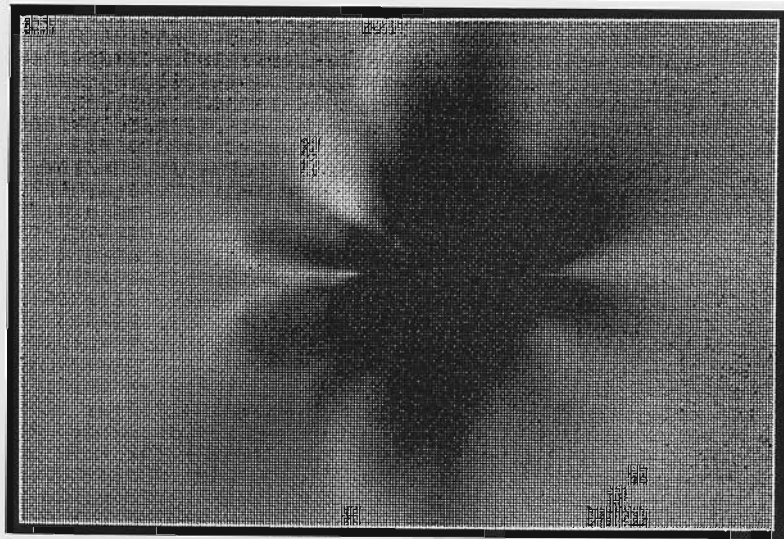
75



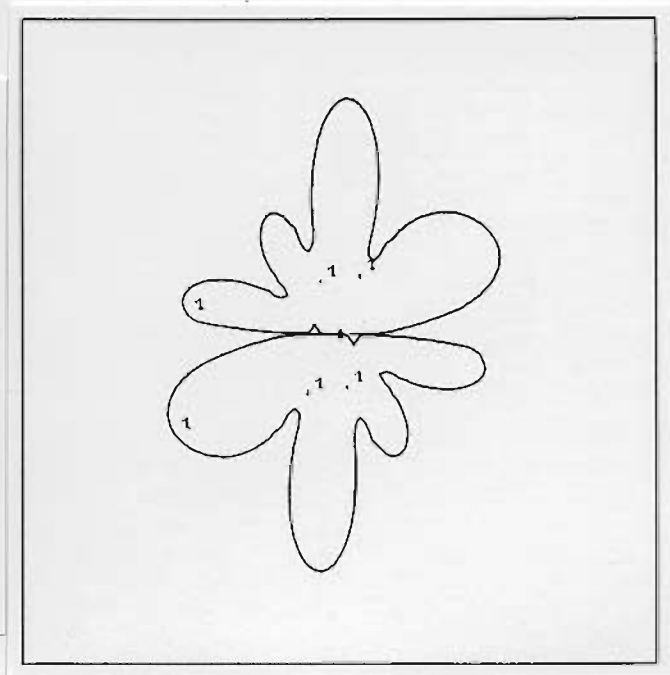
76



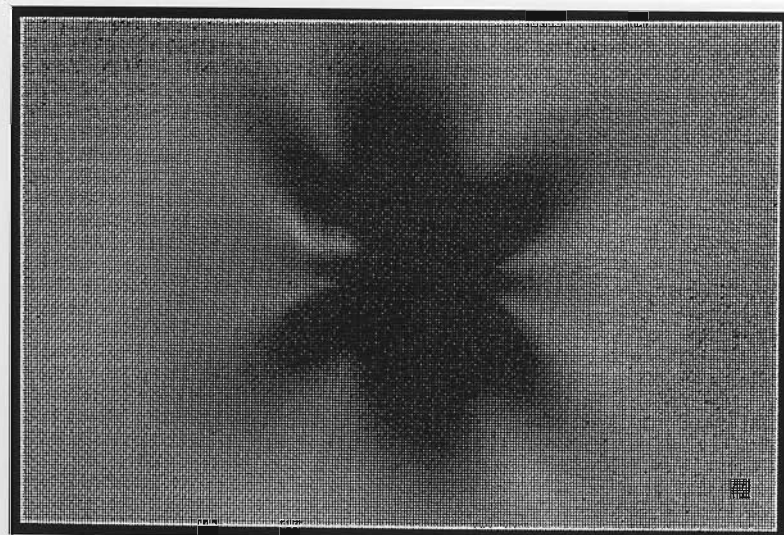
77



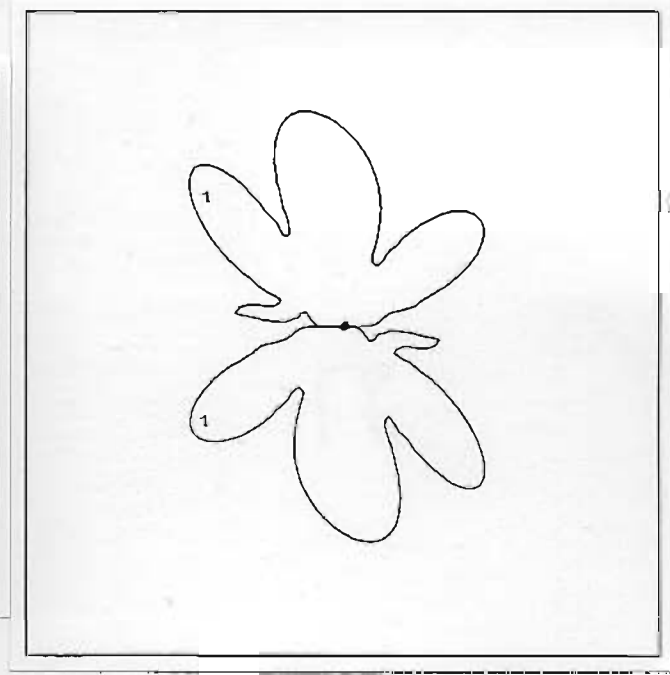
78



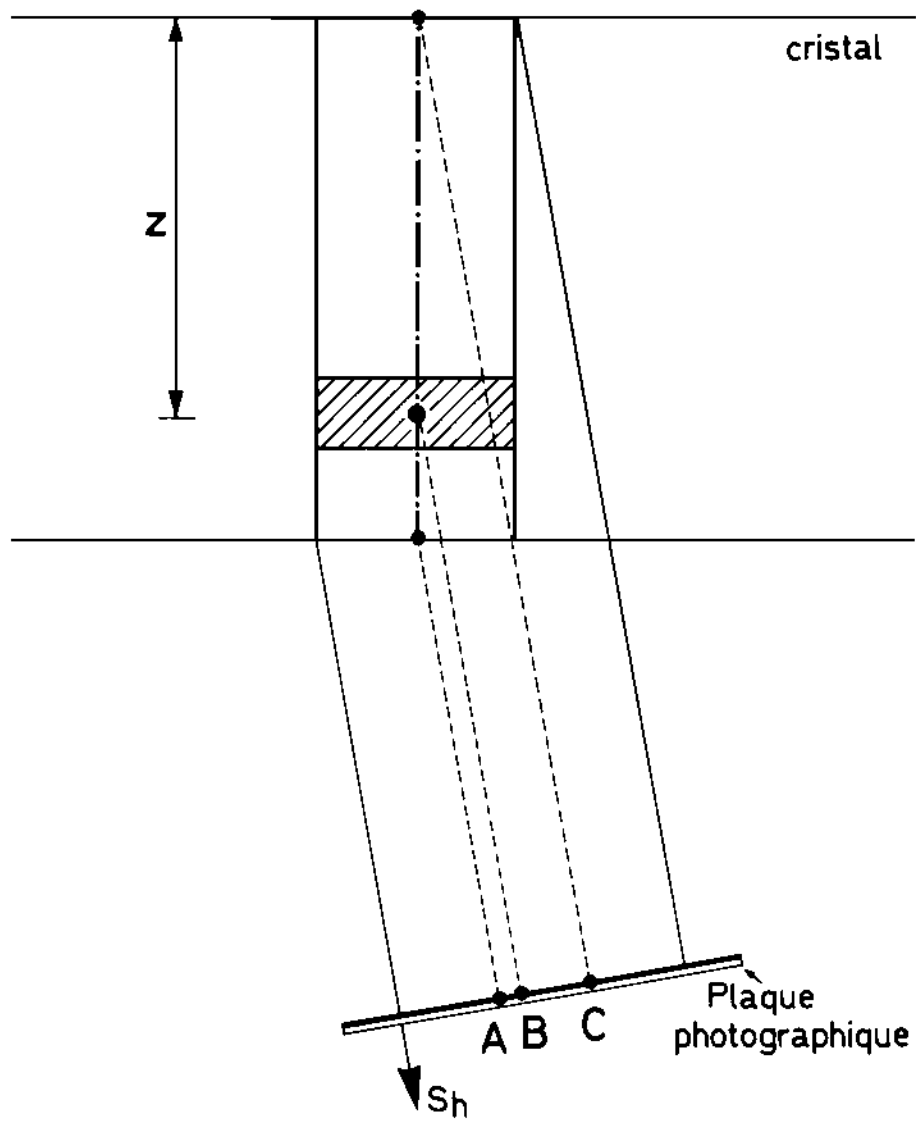
80



79

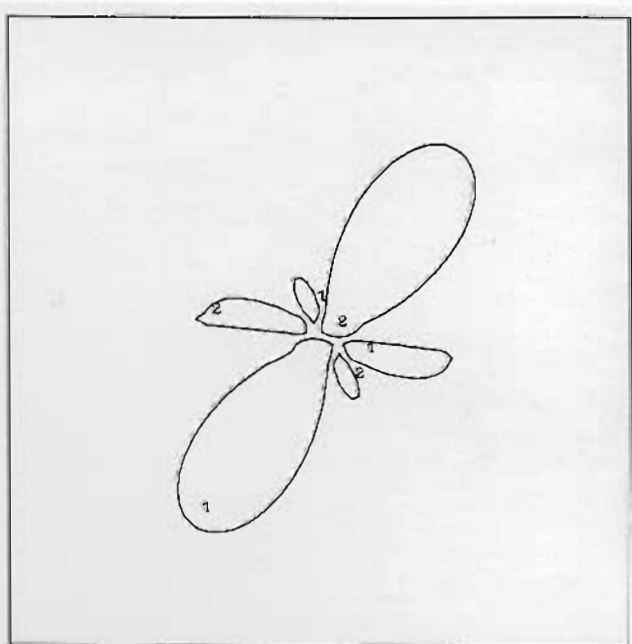


81

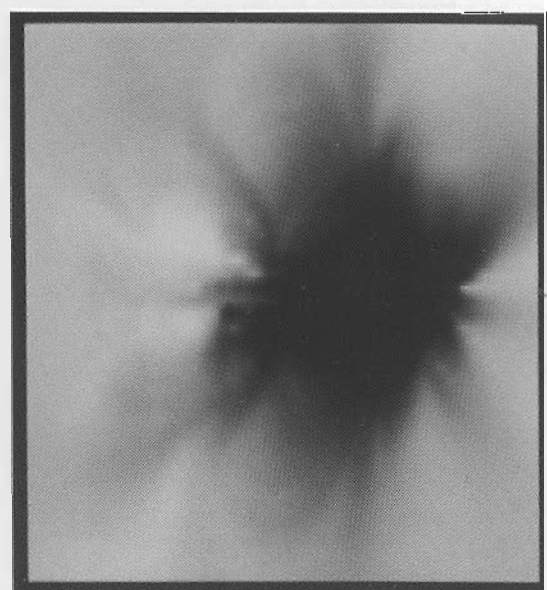




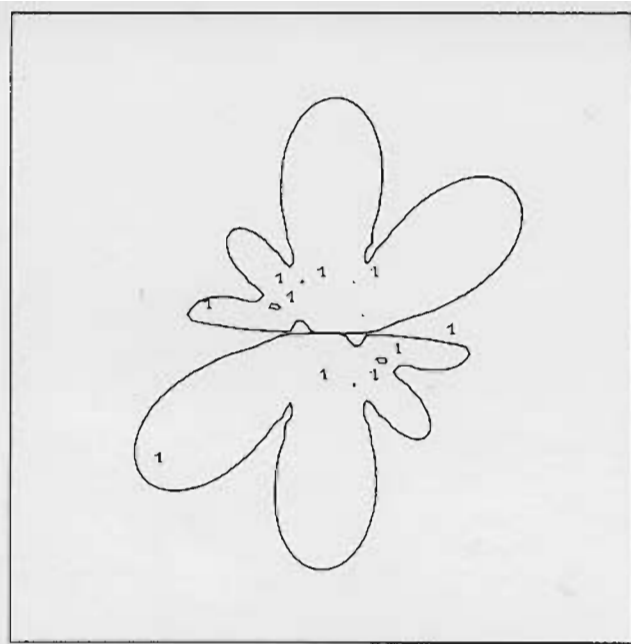
83



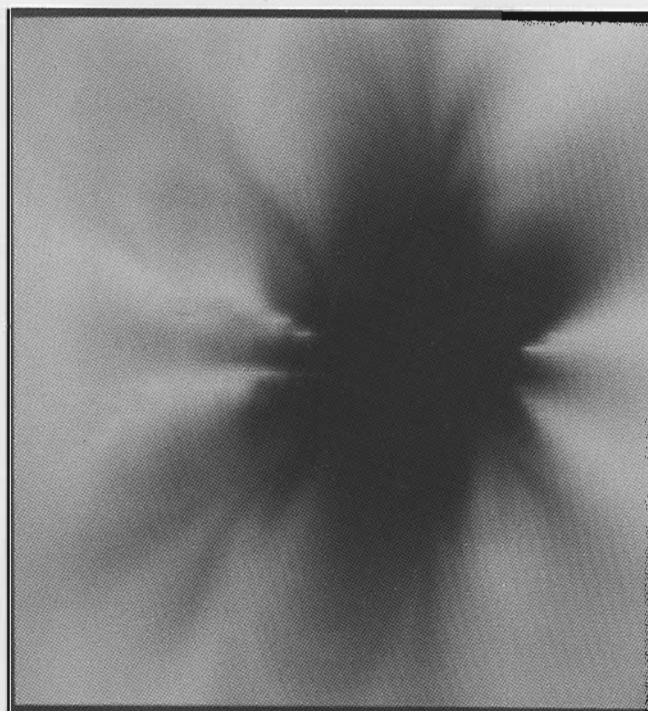
84



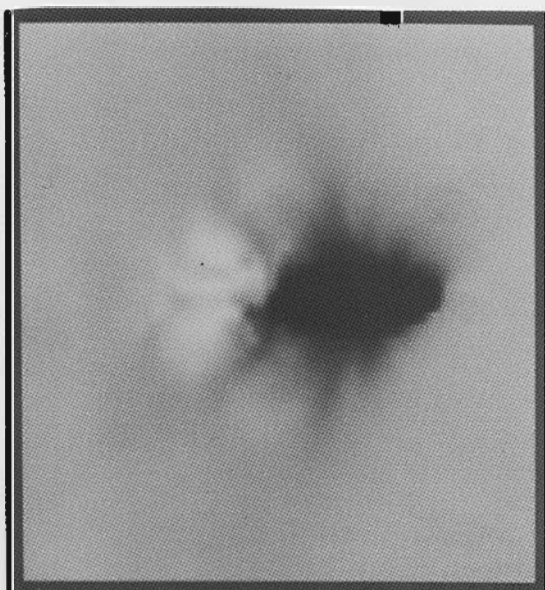
85



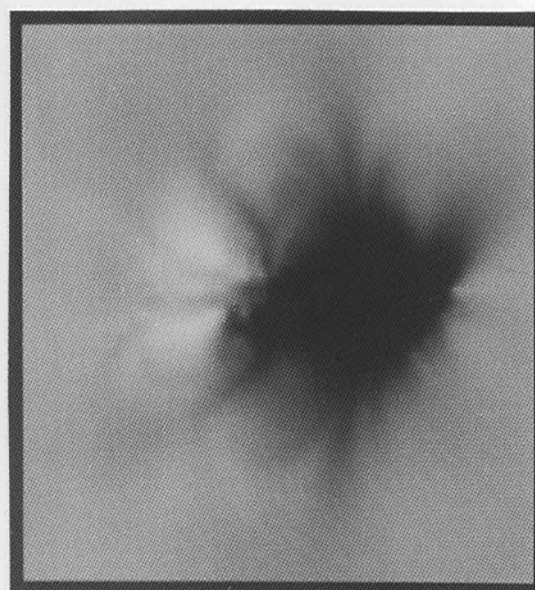
86



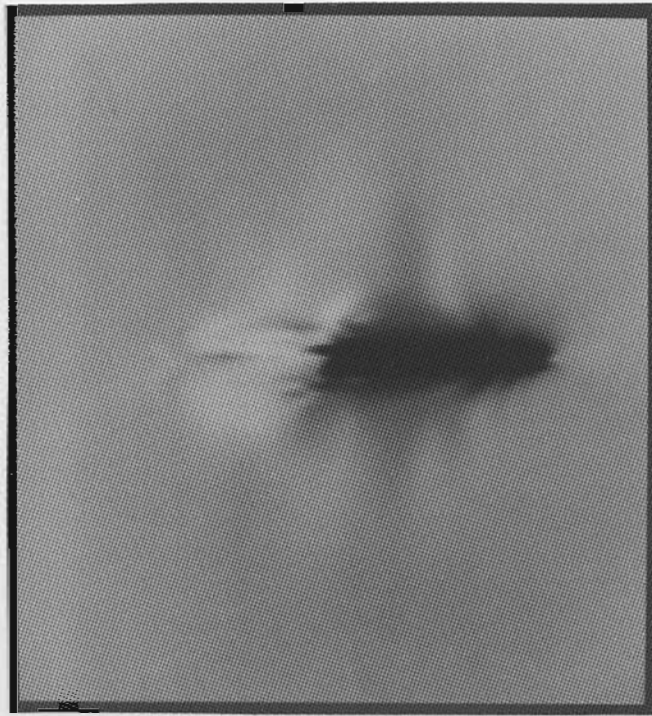
87



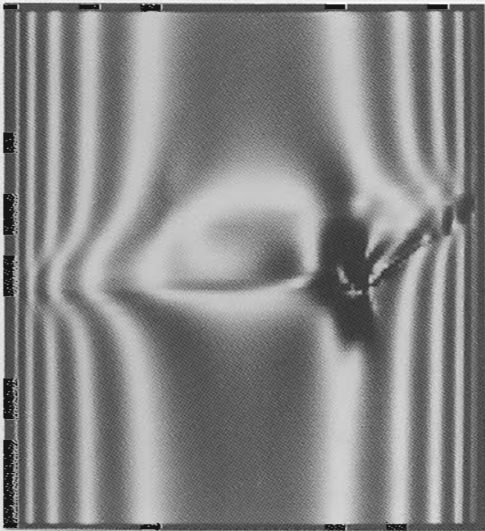
88



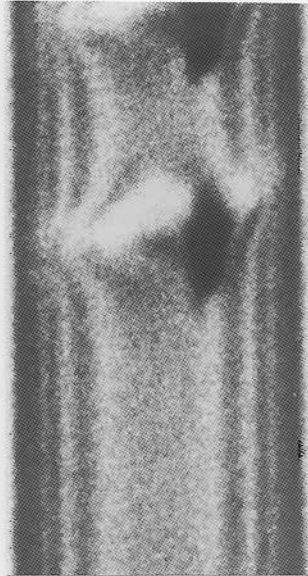
89



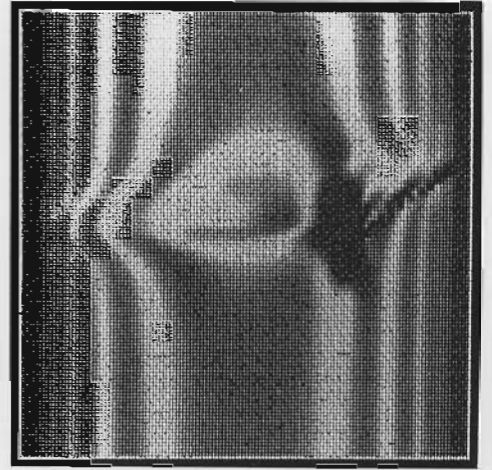
90



92



91



93

- ANNEXES -

	Page
<u>Annexe 1:</u>	
Expression des amplitudes des ondes dans le cristal	54
<u>Annexe 2:</u>	
Principes de la théorie de Kato	55
<u>Annexe 3:</u>	
Méthode de la dérivée au demi-pas:	56
<u>Annexe 4:</u>	
Notions de bases sur l'utilisation du FPS100	57
a) Programmation en Fortran	
b) Language VFC	
c) Programmation en assembleur	
d) Génération d'un module exécutable	
<u>Annexe 5:</u>	
Le sous-programme PL	60
<u>Annexe 6:</u>	
Les données du programme	61
<u>Annexe 7:</u>	
Listing des programmes	64
a) Principal + sous-programmes en FORTRAN	
b) Programme INIT	
c) Sous-programme PL en VFC	
d) Adresses des variables dans le FPS100	
e) Sous-programmes en APAL	

- ANNEXE 1 -

Expression des amplitudes des ondes dans le cristal

Posons: $\Lambda_o = \sqrt{\gamma_o |\gamma_k|} / k |c| \sqrt{\chi_k \chi_{\bar{k}}}$

Λ_o est appelé distance de Pendellosung (ou longueur d'extinction) et correspond à la distance entre deux franges d'interférences dues aux deux champs d'ondes se propageant dans le cristal, le long des plans réflecteurs.

Définissons de plus le paramètre de déviation η par:

$$\eta = \frac{\Delta\theta \sin 2\theta + 1/2 \chi_o (1 - \gamma_k/\gamma_o)}{|c| \sqrt{\chi_k \chi_{\bar{k}}} \sqrt{|\gamma_k|/\gamma_o}}$$

avec:

$$\gamma_o = \cos(\vec{n}, \vec{s}_o) \quad , \quad \gamma_k = \cos(\vec{n}, \vec{s}_k)$$

\vec{n} étant le vecteur unitaire contenu dans le plan d'incidence et le plan réflecteur.

L'expression (16) peut alors être réécrite:

$$R_j = \frac{|c|}{c} \frac{\sqrt{\chi_k \chi_{\bar{k}}}}{\chi_k} \sqrt{\frac{\gamma_o}{\gamma_k}} \left(\eta \pm \sqrt{1 + \eta^2} \right)$$

On en déduit l'expression des amplitudes:

$$\begin{cases} D_{o1} = D^{(a)} (\exp i \phi_{o1}) (\sqrt{1 + \eta_o^2} - \eta_o) / 2 \sqrt{1 + \eta_o^2} \\ D_{k1} = D^{(a)} (\exp i \phi_{k1}) \frac{|c|}{c} \sqrt{\frac{\chi_k \gamma_o}{\chi_{\bar{k}} \gamma_k}} / 2 \sqrt{1 + \eta_o^2} \\ D_{o2} = D^{(a)} (\exp i \phi_{o2}) (\sqrt{1 + \eta_o^2} + \eta_o) / 2 \sqrt{1 + \eta_o^2} \\ D_{k2} = D^{(a)} (\exp i \phi_{k2}) \frac{|c|}{c} \sqrt{\frac{\chi_k \gamma_o}{\chi_{\bar{k}} \gamma_k}} / 2 \sqrt{1 + \eta_o^2} \end{cases}$$

avec: $\phi_{oj} = -\eta_j (\eta_o \pm \sqrt{1 + \eta_o^2}) / (1 + \eta_o^2)$

$$\phi_{kj} = \phi_{k1} - \eta_j \eta_o / (1 + \eta_o^2)$$

ϕ_{kj} = phase du terme h du développement en série de Fourier de χ_k

- ANNEXE 2 -

Principes de la théorie de Kato

L'onde incidente quelconque peut s'écrire sous la forme générale:

$$\phi = \iint_{-\infty}^{+\infty} F(\kappa) \exp(i \vec{\kappa} \cdot \vec{r}) d\kappa_x d\kappa_y$$

z étant la direction de propagation de l'onde.

Si l'on choisit pour F(K) une fonction de Dirac, on retrouve le cas d'une onde incidente plane. Dans le cas d'une onde sphérique:

$$\phi_s = \frac{1}{4\pi r} \exp(i \vec{\kappa} \cdot \vec{r})$$

on doit prendre pour F(K) la fonction:

$$F_s(\kappa) = i / [4\pi^2 \kappa \cos(\vec{\kappa}, \vec{z})]$$

Avec cette théorie, les ondes dans le cristal s'écrivent:

$$\psi_o^{(i)} = \iint_{-\infty}^{+\infty} F(\kappa) \mathcal{D}_{oi} \exp(-2\pi i T^{(i)}) d\kappa_x d\kappa_y$$

$$\psi_h^{(i)} = \iint_{-\infty}^{+\infty} F(\kappa) \mathcal{D}_{hi} \exp(-2\pi i T^{(i)}) d\kappa_x d\kappa_y$$

avec
$$T^{(i)} = [\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_e + \vec{h}_{o,h}^{(i)} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_e)]$$

les valeurs de \mathcal{D}_{oi} et \mathcal{D}_{hi} étant données dans l'appendice 1.

Le calcul des intégrales peut se faire par la méthode de la phase stationnaire et conduit à exprimer les ondes en fonction des fonctions de Bessel J_0 et J_1 (voir Azaroff et al., X-ray diffraction).

- ANNEXE 3 -

Méthode de la dérivée au demi-pas:

Considérons une fonction $f(x)$; on peut écrire ses développements en série de Taylor en $x+p$ et en x :

$$f(x+p) = f(x+p/2) + p/2 \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^2/8 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x+p/2) + \dots$$

$$f(x) = f(x+p/2) - p/2 \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^2/8 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x+p/2) - \dots$$

Par soustraction, on a:

$$f(x+p) = f(x) + p \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^3/24 \frac{\partial^3}{\partial x^3} f(x+p/2) \dots$$

En appliquant ceci au système (30), on obtient:

$$\begin{cases} \mathcal{D}'_o(\omega_o, \omega_h) = \mathcal{D}'_o(\omega_o - p, \omega_h) + 2A \mathcal{D}'_h(\omega_o - p/2, \omega_h) \\ \mathcal{D}'_h(\omega_o, \omega_h) = \mathcal{D}'_h(\omega_o, \omega_h - q) + 2B \mathcal{D}'_o(\omega_o, \omega_h - q/2) + 2W(\omega_o, \omega_h - q/2) \mathcal{D}'_h(\omega_o, \omega_h - q/2) \end{cases}$$

avec $A = -i \frac{\pi}{2} K p \kappa_h$

$$B = -i \frac{\pi}{2} K q \kappa_h$$

$$W = i \pi K \beta'_h q$$

Comme le pas d'intégration est faible et que les amplitudes des champs d'ondes varient lentement, on fait de plus l'approximation que:

$$f(x+p/2) \approx \frac{1}{2} [f(x) + f(x+p)]$$

Ceci nous donne le système (38).

- ANNEXE 4 -

Notions de bases sur l'utilisation du FPS100

Dans cet annexe nous décrivons succinctement les trois manières différentes d'utiliser le FPS100, puis la marche à suivre pour générer le module exécutable d'un programme.

a) Programmation en Fortran:

La manière la plus simple, et à la portée des programmeurs de tous les niveaux, consiste à employer la bibliothèque mathématique du processeur vectoriel. Celle-ci possède en effet un ensemble de plus de 230 sous programmes écrits en assembleur et appelables directement à partir d'un programme Fortran par un CALL habituel. Ces sous programmes permettent des opérations portant sur des vecteurs, des matrices, ainsi que des transformées de Fourier, du traitement d'image ...ect. La seule différence pour l'utilisateur, par rapport à la programmation Fortran usuelle, est qu'il devra gérer lui-même les adresses des variables dans le FPS100 ainsi que le synchronisme des opérations entre ordinateur hôte et processeur vectoriel.

A titre d'exemple la figure 33 montre un programme au cours duquel on effectue la transformée de Fourier d'un tableau TAB de 8192 éléments et l'inversion d'une matrice MAT 50x50.

Après le calcul des adresses que l'on va utiliser, l'initialisation du FPS100 se fait grâce à l'appel au sous programme APINIT. Puis le tableau et la matrice sont transférés de l'ordinateur hôte dans le processeur vectoriel à l'aide du sous programme APPUT, aux adresses IATAB=1 et IAMAT=8193 respectivement. Avant de lancer le calcul par RFFT et MATINV le programmeur doit s'assurer que le transfert est terminé en appelant le sous-programme APWD. De même avant de ramener les résultats dans l'ordinateur hôte avec le sous programme APGET, il faut attendre la fin des calculs dans le FPS100: ceci est réalisé par APWR.

La transformée de Fourier envisagée dans cet exemple s'exécute en 39.13 ms et l'inversion de la matrice en 220.4 ms, ce qui donne une idée des performances du processeur vectoriel.

b) Language VFC:

Dans l'exemple précédent (figure 33) lors du CALL RFFT(-), le programme principal s'exécutant sur l'ordinateur hôte charge à partir de celui-ci le code correspondant au sous programme assembleur RFFT dans la mémoire programme (PS) du FPS100; puis il ordonne l'exécution de ce sous programme, et se met en attente.

Lorsque la transformée de Fourier est terminée, le processeur

vectorel le signale au programme principal. Celui-ci rencontre l'instruction suivante CALL MATINV(-): il charge donc le sous programme MATINV dans le FPS100 et lance son exécution.

Si un grand nombre de sous programmes sont appelés successivement, on aura une perte de temps due d'une part au chargement de chacun de ces sous programmes, et d'autre part aux dialogues entre l'ordinateur principal et le processeur vectoriel lors de chaque appel.

Pour éviter ceci on peut "chainer" ces sous programmes grace à un logiciel appelé VFC (Vector Function Chainer), qui permet de plus de faire des tests, donc des boucles. Cette opération de chainage consiste à remplacer tout un ensemble de sous programmes et d'instructions simples par un sous programme unique qui sera chargé en une seule fois.

On limite ainsi les échanges entre processeur vectoriel et ordinateur hôte. Ceci présente l'avantage de libérer l'ordinateur principal pendant l'exécution dans le FPS100, et de lui permettre de faire d'autres calculs en parallèle, ou d'être disponible pour les autres utilisateurs travaillant au même moment.

c) Programmation en assembleur:

La manière la plus efficace d'utiliser le FPS100 est bien sur de le programmer directement en APAL (Array Processor Assembler Language). Cela demande cependant un travail long et délicat afin de faire fonctionner en parallèle les différents processeurs ainsi que gérer les mémoires. On trouve une description complète du jeu d'instructions disponibles ainsi que de leur rôle dans le manuel du constructeur: FPS100 Programmer's Reference Manual (Volumes 1 et 2).

La réalisation du programme de simulation a demandé la réécriture en APAL du coeur du programme, à partir d'une version Fortran. Ceci a nécessité une réorganisation des calculs en vue de profiter au maximum de la structure du processeur vectoriel.

d) Génération d'un module exécutable:

La figure 34 montre la marche à suivre pour générer le module exécutable d'un programme utilisant le FPS100.

Les sous-programmes à chainer écrits en langage VFC sont traduits en assembleur APAL par VFC100 puis assemblés, ainsi que les programmes écrits en assembleur par l'utilisateur, grace à ASM100.

Le "loader" LOD100 va ensuite chercher dans une bibliothèque tous les sous programmes appelés par les programmes assemblés. Le loader génère le code exécutable pour le FPS100 sous forme de DATA ou bien directement dans un fichier sur disque. L'avantage du fichier sur disque, outre de diminuer la taille mémoire du module exécutable dans l'ordinateur hôte, est de permettre l'emploi d'un simulateur SIM100 et d'un "debugger" DBG100 qui sont des outils très utiles lors de la mise au point des programmes assembleurs. LOD100 génère aussi des sous programmes Fortran qui seront appelés par le

programme utilisateur et dont le rôle essentiel est de charger le code exécutable dans le FPS100 et de lancer son exécution.

Les sous-programmes Fortran écrits par l'utilisateur et ceux générés par LOD100 sont ensuite compilés.

Enfin le Linker va procéder à l'édition des liens en allant chercher en particulier tous les sous programmes de communication et de synchronisation entre ordinateur hôte et FPS100 (bibliothèque APEX), ainsi que les sous programmes du processeur vectoriel appelés directement à partir du Fortran (bibliothèque HSR).

- ANNEXE 5 -

Le sous-programme PL

Ce sous-programme est formé de modules écrits en langage assembleur APAL et liés, comme le montre l'organigramme de la figure 42, grace au langage VFC.

Il commence par mettre à zéro le tableau dans lequel vont être sommées les intensités réfléchies dues à chaque position du point source sur la face d'entrée du cristal.

Le module CHOIX choisit ensuite le réseau d'intégration qui va être utilisé. Pour ce on compare l'abscisse du point source avec les limites XD1 et XD2 (figure 43) de la projection sur la face d'entrée de la zone où se forme l'image directe du défaut. (La taille de cette zone a été estimée lors des calculs préparatoires). Si le point source est situé entre A1 et XD1, ou entre A1 et XD2, le faisceau direct est éloigné de la zone très déformée donc on choisit le réseau normal (figure 19-a). Par contre si le point source est situé entre XD1 et XD2 on doit prendre le réseau avec raffinement (figure 19-b).

Dans le cas où le réseau choisit n'est pas celui utilisé précédemment, on doit effectuer le chargement de ce nouveau réseau et calculer certaines variables intervenant dans l'intégration des équations de Takagi.

Le module DIJMAX appelé ensuite (figure 42) a pour rôle de déterminer les valeurs maximales IMAX et JMAX de l'indice I repérant les points du réseau, et de l'indice J repérant les lignes parallèles à \vec{s}_0 . Ces valeurs maximales dépendent à la fois du type du réseau et de la position du point source. Comme nous l'avons expliqué au paragraphe B-3-d, elles permettent de ne calculer la propagation des ondes que dans la partie utile du triangle de Borrmann.

PL se poursuit par des initialisations correspondant aux conditions aux limites sur les bords du réseau d'intégration. Puis le module ESSAI calcule la propagation des ondes dans la partie utile du triangle de Borrmann en intégrant les équations de Takagi suivant l'algorithme décrit au paragraphe B-3-b, et permet d'obtenir ainsi l'intensité réfléchie sur la face de sortie du cristal.

Pour se ramener à un échantillonnage de points équidistants le module ECLAT "éclate" le tableau de résultats, puis l'additionne au tableau final en effectuant un décalage adéquat des points (figure 40).

Quand toutes ces opérations ont été effectuées pour chacune des positions du point source, c'est-à-dire qu'on a calculé la propagation des ondes dans tous les triangles de Borrmann nécessaires, le sous programme PL se termine par un appel au module APOD qui réalise l'apodisation du tableau final.

- ANNEXE 6 -

Les données du programme

Avant de décrire les données du programme, il est bon de préciser le repère macroscopique imposé à l'utilisateur. Ce repère, commun à tous les programmes de simulation développés au laboratoire, est représenté figure 45 (a). Le plan (xOy) correspond à la face d'entrée et l'axe Oz est normal à cette face et dirigé vers l'intérieur du cristal. Par convention le cristal est situé du côté des y négatifs. Si l'on se place dans le plan (xOz) avec l'axe y fuyant devant soi (figure 45-b) on voit le faisceau réfracté à gauche et le faisceau réfléchi à droite.

Le programme travaille aussi dans d'autres repères dont on peut trouver une description détaillée dans la notice sur le programme DEFV (Epelboin-1980).

Précisons maintenant la liste des données que l'utilisateur devra fournir.

- TITRE: titre laissé au choix de l'utilisateur, et ne devant pas dépasser 72 caractères. Ce titre sera imprimé en tête du fichier contenant l'image simulée.
- KPERF: facteur d'apodisation. C'est le rapport entre la distance séparant deux points sur l'image et le pas de calcul moyen (PMEAN) sur la face de sortie du cristal. KPERF ne doit pas dépasser la valeur 4. Le pas de déplacement du point source sur la face d'entrée du cristal est égal à KPERF*PMEAN. Cela signifie que si l'utilisateur choisit KPERF petit il obtiendra une image ayant une bonne "résolution" mais avec un temps de calcul long. Pour KPERF grand il aura en un temps plus court une image de "résolution" moins bonne.
- IO: Si IO=0 (option recommandée) les valeurs des intensités sortiront uniquement dans le fichier associé à l'unité 1. Sinon ces valeurs seront aussi imprimées sur le terminal associé à l'unité logique IO.
- PZY: rapport des distances entre lignes et colonnes sur le terminal qui servira à visualiser l'image. Pour un terminal graphique de type Tektronix ou écran de télévision on prendra PZY=1. Sur une imprimante à 6 ou 8 lignes par inch il faut PZY=1.771 et PZY=1.328 respectivement.
- IMP: si égal à 1 on calcule toutes les lignes de l'image.
Si égal à 2 on calcule une ligne sur 2 seulement, la ligne manquante étant interpolée.
Si égal à trois on ne calcule qu'une ligne sur 3.
- IDEF: si égal à 1 on utilise lors de l'intégration le réseau à pas variable normal (figure 19-a).
Si égal à 0 on utilise, dans la région où la dislocation est proche du faisceau direct, le réseau raffiné (figure 19-b). Comme la

profondeur du coeur de la dislocation change quand on passe d'un plan d'incidence au suivant, on doit recalculer ce deuxième réseau, ce qui amène une perte de temps par rapport à l'option IDEF=1.

IOPT:

variable servant à choisir les pas du réseau d'intégration, comme indiqué dans le tableau suivant (en microns):

! IOPT !	PINIT !	PMEAN !	PMAX !
!-----!-----!-----!-----!			
! 1 !	! 0.2 !	! 0.8 !	! 1.6 !
! 2 !	! 0.1 !	! 0.4 !	! 0.8 !
! 3 !	! 0.1 !	! 0.8 !	! 1.6 !
!-----!-----!-----!-----!			

avec PINIT pas minimum de calcul sur la face de sortie, PMEAN pas moyen et PMAX pas maximum. L'option IOPT=1 est recommandée car c'est la plus rapide et sa précision est suffisante. La résolution de l'image obtenue est égale à KPERF*PMEAN.

ONDE: λ

longueur d'onde en microns de la radiation utilisée.

TETA: θ

angle de Bragg en degré pour la réflexion choisie.

ALPHA: ψ

angle entre la normale à la face d'entrée du cristal et le faisceau réfracté (figure 45-b). ALPHA est généralement négatif et dans le cas symétrique on a ALPHA=-TETA.

ABSORB: μ

absorption photoélectrique par micron.

TOTALE: t

épaisseur du cristal en microns.

QHIM(2): $\chi_{\bar{h}}$

composante -h du développement en série de Fourier de la susceptibilité électrique du cristal. QHIM comporte une partie réelle et une partie imaginaire:

$$\chi_{\bar{h}} = \chi_{\bar{h}}^{(r)} + i \chi_{\bar{h}}^{(i)}$$

QHIP(2): χ_h

composante h du développement en série de Fourier de la susceptibilité électrique.

$$\chi_h = \chi_h^{(r)} + i \chi_h^{(i)}$$

Note: ne pas confondre $\chi_h^{(r)}$ et $\chi_h^{(i)}$ avec χ_{rh} et χ_{ih} qui sont des complexes.

A(3):

paramètres de la maille en microns.

ANG(3):

cosinus des angles de la maille cristallographique.

B(3):

composantes du vecteur de Burgers de la dislocation dans le repère cristallographique.

DISL(3):

composantes d'un vecteur parallèle à la ligne de la dislocation dans le repère utilisateur de la figure 45 (a).

RN(3):

indices de la normale à la face d'entrée du cristal orientée vers l'intérieur.

RF(3): indices de la réflexion h choisie.

XC,YC,ZC: coordonnées en microns d'un point de la ligne de la dislocation, données dans le repère utilisateur.

YT: hauteur de l'image que l'on désire simuler en microns.

OMEG1,OMEG2: Ω_1, Ω_2
abscisses en microns dans le repère utilisateur (figure 45) des points de la face de sortie du cristal délimitants l'image à simuler (figure 38).

BT(16): C_{ij}
composantes du tenseur élastique dans l'ordre suivant:

C11	C12	C13	C14	C15	C16
	C22	C23	C24	C25	C26
		C33	C34	C35	C36
			C44	C45	C46
				C55	C56
					C66

MAXPL: nombre maximum de plans à calculer. Les temps de calcul étant parfois très longs, en particulier pour les cristaux épais, il peut être nécessaire d'effectuer la simulation en plusieurs fois. Connaissant par un essai préliminaire le temps de calcul d'un plan d'image, l'utilisateur peut grâce à MAXPL arrêter le calcul au bout du temps qu'il désire.

- ANNEXE 7 -

Listing des programmes

```

C *****
C *
C * PROGRAMME ADELE VERSION 2 MAI 1982
C * CE PROGRAMME UTILISE UN PROCESSEUR VECTORIEL FPS100
C * SIMULATION DE TOPOGRAPHIES EN TRANSLATION POUR DISLOCATIONS
C * PAR ADDITION DE SECTIONS DECALEES
C * REFERENCES :
C * AUTHIER ET AL. ACTA CRYST.A26,647 1968
C * AUTHIER ET AL. PHYS.STAT.SOL.21,413 1967
C * TAKAGI ACTA CRYST.15,311 1962
C * STROH PHIL.MAG.3,625 1958
C * EPELBOIN J.APPL.CRYST.(1974),7,372
C * EPELBOIN ACTA CRYST.(1977) A33,758
C * EPELBOIN ET AL. PHYS.STAT.SOL.A 54,547 1979
C * EPELBOIN - ACTA CRYST. (1983) A39,761
C *
C * A.SOYER ET EPELBOIN
C * LABORATOIRE DE MINERALOGIE CRISTALLOGRAPHIE,
C * ASSOCIE AU CNRS,UNIVERSITE P.M.CURIE
C * 75230 PARIS CEDEX05,FRANCE (01) 3362525 EXT.5216
C *
C *****
C *
C * LEGENDE DES DONNEES :
C *
C * MAXPL NOMBRE MAXIMUM DE PLANS A CALCULER
C * TITRE CHAINE DE 72 CARACTERES POUR LE TITRE
C * KPERFO,IO,PZY,IMP,IDEF,IOPT
C * (VOIR COMMENTAIRES PLUS BAS)
C * ONDE LONGUEUR D'ONDE
C * TET ANGLE DE BRAGG
C * ALPHA ASSYMETRIE DE LA REFLEXION ALPHA=(N,SO) ORIENTE
C * ATTENTION SO A GAUCHE DE SH
C * ABSORB ABSORPTION PHOTOELECTRIQUE
C * TOTALE EPAISSEUR DU CRISTAL
C * QHIM,QHIP SUSCEPTIBILITES DIELECTRIQUES
C * A,ANG PARAMETRES DU CRISTAL
C * B,DISL VECTEUR DE BURGERS,ORIENTATION DE LA DISLOCATION
C * RN NORMALE A LA FACE D'ENTREE
C * RF VECTEUR RECIPROQUE DE LA REFLEXION
C * XC,YC,ZC COORDONNEES D'UN POINT DE LA DISLOCATION
C * YT HAUTEUR DE L'IMAGE
C * OMEG1,OMEG2 ABSCISSES DES BORDS DE L'IMAGE
C * BT COEFFICIENTS ELASTIQUES
C *

```

```

*****
*****
*
* CORRECTIONS
*
* VERSION DEBUGGEE ..... 17/05/1982 *
* VERSION AMELIOREE ..... 16/07/1982 *
* TABLEAU STOR MIS A 4*IDIM ..... 09/11/1982 *
* B INVERSE AVEC LA LIGNE ..... 19/11/1982 *
* CALCUL DE AJ ..... 19/11/1982 *
* APODISATION DANS L'A.P. .... 14/12/1982 *
*
*****

```

ORIENTATION DU VECTEUR RECIPROQUE DU POINT O VERS H

```

UNITE 1 = SORTIE DE L'IMAGE
UNITE 5 = LECTURE DES DONNEES
UNITE 6 = IMPRESSION DES RESULTATS
UNITE 12 = FICHER DE SAUVEGARDE SOV1
UNITE 13 = FICHER DE SAUVEGARDE SOV2
UNITE 14 = FICHER DE SAUVEGARDE SAUV1 OU SAUV2

```

```

-----
COMMON /IMPA/IPL,IPLAN,STOR1(1024)
COMMON /IMPB/TITRE
COMMON /PRIN1/ONDE,TOTALE,AJ,PMEAN
COMMON /PRIN2/COSDIR,SINDIR,COSALP,SINALP,COSALT,SINALT,TANALP,
1 TANDIR,SINTET,SIN2TE
COMMON /PRIN3/SOMREF(1024),K,XOM1,XOM2,XOR
COMMON /APCOM1/SO,CO,DA2,DA8,DA1,DA7,SH,CH,SH1,CH1
2,CC2(2),CNAP(12),COAP(9),AP2,AP1,FOU,FACTOR
COMMON /PRIN5/CRAP,QHIAP(4),KPERFO
COMMON /PRIN6/XD1,XD2,DMLX,IDEF,KPERF,NBSEC,IERROR
COMMON /RESPRI/XSID1,XSID2,EP1,EP2
COMMON /DEF2/DA(9)
COMMON /DEF3/CN(12),CO3(3),CO4(3),CO5(3)
COMMON /DEF4/XC,YC,ZC,YT,OMEG1,OMEG2,DISL(3)
COMMON /RES1/TRANSV(1000),P(1000),Q(1000),NTV(20),IN1
COMMON /RES2/TRV1(1000),P1(1000),Q1(1000),NTV1(20),INN1
COMMON /CONST/PI
COMMON /CDIR/ZONE,PAS,ROCK
COMMON /CRES/PINIT,AFIN
COMMON /COPT/OPT(2,3)
COMMON /POICOM/POI7(32),POI15(32),POI23(32),POI31(32)
COMPLEX C1,C2
EQUIVALENCE (CC2(1),C2)
CHARACTER * 4 TITRE(18),TEST
INTEGER *2 NTV,NTV1,IN1,INN1,IERROR,K,MEMOR,KPERFO,IDEF,NBSEC
INTEGER * 4 KUTIL,IPL
CHARACTER *8 NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2
DIMENSION INVERS(2),STR(48),QHIM(2),QHIP(2),POI(32)
DATA TEST/'TEST'/,INVERS/2,1/,MEMOR/3/

```

MISE EN FORME DU PROGRAMME

CONTROLE DES SORTIES DES RESULTATS

IO = 0 - SORTIE DES DONNEES SUR LISTING, DES RESULTATS
SUR DISQUE UNIQUEMENT.

6 - SORTIE SUR LISTING DES DONNEES ET RESULTATS.
=====>> THIS VALUE MUST BE CHANGED IF LINEPRINTER
ATTACHED TO A DIFFERENT LOGICAL UNIT

IMP = 1 - CHAQUE PLAN D'INCIDENCE EST CALCULE
2 - UN PLAN D'INCIDENCE SUR DEUX EST CALCULE
3 - UN PLAN D'INCIDENCE SUR TROIS EST CALCULE

IDEF = 0 - UTILISATION D'UN RESEAU AVEC RAFFINEMENT
POUR PRENDRE EN COMPTE L'IMAGE DIRECTE
1 - DEFAULT NON PRIS EN COMPTE

IOPT CHOIX DE LA VALEUR DES PAS D'INTEGRATION
POUR LE CALCUL DES SECTIONS.
VALEURS POSSIBLES DE PINIT, PMAX ET PMEAN:

IOPT ! AFIN ! PMEAN ! PINIT ! PMAX !

1	4.	0.8	0.2	1.6
2	4.	0.4	0.1	0.8
3	8.	0.8	0.1	1.6

KPERFO PAS DE REPRESENTATION SUR UNE LIGNE EGAL A KPERFO*PMEAN
REDUCTION MAXIMUM POSSIBLE 4 FOIS

PAS VERTICAL A CHOISIR SUIVANT L'UNITE DE REPRESENTATION
CHOISIE

IMPRIMANTE A INTERVALLE 1/6 POUCE PZY=1.771

IMPRIMANTE A INTERVALLE 1/8 POUCE PZY=1.328

ECRAN DE TELEVISION PZY=1.

VERTICAL STEP TO BE CHOSEN ACCORDING TO THE OUTPUT DEVICE

LINEPRINTER 1/6 PZY= 1.771

LINEPRINTER 1/8 PZY= 1.328

SCREEN PZY= 1.

DEBUT DU PROGRAMME NORMAL OU A PARTIR DES SAUVEGARDES

READ(5)NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2
OPEN(12,FILE=SOV1,FORM='UNFORMATTED')
OPEN(13,FILE=SOV2,FORM='UNFORMATTED')
READ(12)NUMPL1
READ(13)NUMPL2

```

      IF(NUMPL1.EQ.NUMPL2) GO TO 420
      IF(NUMPL1.LT.NUMPL2) GO TO 410
      IF(NUMPL2.EQ.0) GO TO 420
      NUMPL=NUMPL2
      READ(13)MAXPL,XOR
      OPEN(14,FILE=SAUV2,FORM='UNFORMATTED')
      INDIC=2
      GO TO 412
410  NUMPL=NUMPL1
      READ(12)MAXPL,XOR
      OPEN(14,FILE=SAUV1,FORM='UNFORMATTED')
      INDIC=1
412  READ(14)XC,ZC,XD1,XD2,IDEF,DMLX
      READ(14)TRANSV,P,Q,NTV,IN1
      READ(14)TRV1,P1,Q1,NTV1,INN1
      READ(14)SO,SH,CO,CH,SH1,CH1,C1,C2
      READ(14)DA,CN,CO3,CO4,CO5,AP1,AP2
      READ(14)CR,QHIM,QHIP,FACTOR,FOU,KPERFO
      READ(14)PMEAN,KPERF,NBSEC,PX,PZ,XOM1,XOM2,AFIN
      READ(14)IO,IMP,IPLAN,IPL,TITRE,STOR1,ONDE
      READ(14)TANALP,TANDIR,TBOR,EP1,EP2,PINIT
      CLOSE(12)
      CLOSE(13)
      CLOSE(14)
      GO TO 480
C-----
C
420  READ(12)MAXPL,XOR
      CLOSE(12)
      CLOSE(13)
      READ(5)TITRE,KPERFO,IO,PZY,IMP,IDEF,IOPT
      KPERF = KPERFO
      AFIN=OPT(2,IOPT)
      KPERFO =IFIX(AFIN)*KPERFO
      PINIT=OPT(1,IOPT)
      IF(IO.EQ.0) PRINT 1001
1001  FORMAT(1H0,'SORTIE DES RESULTATS SUR DISQUE UNIQUEMENT'//)
CX1001  FORMAT(1H0,'OUTPUT ON DISK ONLY'//)
C
      ERREUR SI UNITE 9 NON DEFINIE
C
      IF(IO.EQ.9) PRINT 1003
1003  FORMAT(1H0,'RETOUR DES RESULTATS PAR LA NAVETTE '/1H1)
C
      PRINT 1000,TITRE,IMP
1000  FORMAT('0          PROGRAMME ADELE. TOPOGRAPHIES EN TRANSMISSION'//
CX1000  FORMAT('0          PROGRAMM  ADELE.          TRAVERSE TOPOGRAPH'//
1      '          -----'//
2      '0          ',18A4///' CALCUL DE UN PLAN SUR ',I3)
CX 2      '0          ',18A4///' ONE OVER ',I3,' PLANE CALCULATED')
      WRITE(6,1015)IDEF,IOPT,KPERF
1015  FORMAT(' IDEF=',I2,' IOPT=',I2,' KPERF =',I2)
      PRINT 1014
1014  FORMAT(//)

```

```

C
C-----
C  ENTREE DES DONNEES RAYONS X
C-----
C
      READ (5)ONDE,TET,ALPHA,ABSORB,TOTALE,QHIM,QHIP
      WRITE (6,1004)  ONDE,TET,ALPHA,ABSORB
2,QHIM,QHIP
1004  FORMAT('O  CARACTERISTIQUES DE LA DIFFRACTION'/
1      '  -----'/
2'OLONGUEUR D ONDE ',E13.5,' MICRON'/' THETA',10X,F7.3,
A10X,' DEGRES'/
3' PSI ZERO',7X,F7.3,10X,' DEGRES'/' MU',14X,F9.6,7X,' PAR MICRON'/
3//15HOKHI  H MOINS R,E13.5,'    , KHI  H MOINS I',E13.5
4 /15H KHI  H PLUS  R,E13.5,'    , KHI  H PLUS  I',E13.5,/)
      TET = TET*PI/180.
      ALPHA = ALPHA*PI/180.
      SINTET=SIN(TET)
      COSTET=COS(TET)
      COSDIR=COS(ALPHA+2.*TET)
      SINDIR=SIN(ALPHA+2.*TET)
      COSALP=COS(ALPHA)
      SINALP=SIN(ALPHA)
      TANALP=TAN(ALPHA)
      COSALT=COS(ALPHA+TET)
      SINALT=SIN(ALPHA+TET)
      TANDIR=SINDIR/COSDIR
      SIN2TE = SIN(2.*TET)
      AJ=(QHIM(1)*QHIP(1)-QHIM(2)*QHIP(2))**2
S  +(QHIP(1)*QHIM(2)+QHIP(2)*QHIM(1))**2
      AJ=SQRT(AJ)
      DTET=2.062648E+05*2.*SQRT(AJ*COSDIR/COSALP)/SIN2TE
      ALANDA = ONDE*SQRT(COSALP*COSDIR/AJ)
      PRINT 1010,DTET,ALANDA
1010  FORMAT('OLARGEUR A MI HAUTEUR DU PROFIL DE REFLECTION ',F7.3,
1' SECONDES'/' LONGUEUR D'ONDE D'EXTINCTION',17X,F7.3,
2' MICRONS'/////))
CX1010  FORMAT('OROCKING CURVE HALF WIDTH ',F7.3,' SECONDS'/
CX  1' EXTINCTION DISTANCE ',F7.3,' MICRONS'/////))
      DTET=2.*ROCK*SIN2TE*DTET/2.062648E+05
      AJ=SIN2TE*SIN2TE*ONDE*ONDE/(AJ*COSALP*COSDIR*PI*PI)
C
C  FIN DES CALCULS GENERAUX DE LA DIFFRACTION
C
C-----
C  CARACTERISTIQUES DU DEFAUT
C
      PRINT 1011
1011  FORMAT('O  CARACTERISTIQUES DU DEFAUT'/
1      '  -----'/)
CX1011  FORMAT('O  DATA OF THE DEFECT '/
CX  1      '  -----'/)
      CALL DEFAUT

```

```

C
C-----
C   ATTENTION XC ET ZC RECALCULES DANS LE PREMIER PLAN
C-----
C
  XC = XC -YC*DISL(1)/DISL(2)
  ZC = ZC-YC*DISL(3)/DISL(2)
  PMEAN=PINIT*AFIN
  PPX=PMEAN*FLOAT(KPERF)*COSDIR
  PY1=PPX*PZY
  PY=FLOAT(IMP)*PY1
  PZ1=PY1*DISL(3)/DISL(2)
  PX1=PY1*DISL(1)/DISL(2)
  PZ=FLOAT(IMP)*PZ1
  PX=FLOAT(IMP)*PX1
  DISL(1)=PX
  DISL(2)=PY
  DISL(3)=PZ
C
C-----
C   CALCUL DE LA DEMI-LARGEUR DE L'IMAGE DIRECTE
C-----
C
  CALL DIRECT(DTET,DMLX)
C
C-----
C   CALCUL DU RESEAU D'INTEGRATION
C-----
C
  PRINT 1012
1012  FORMAT(////'0   CARACTERISTIQUES DU RESEAU D'INTEGRATION'/
1      '   -----'/)
CX1012  FORMAT(////'0   NETWORK OF INTEGRATION'/
CX      '   -----'/)
  CALL RESEAU
  IPLAN = IFIX(YT/PY+0.5) + 1
  IF(IPLAN.EQ.1) IPLAN = 2
  IPL = IMP*(IPLAN - 1) + 1
1005  FORMAT('OPAS DE CALCUL HORIZONTAL PRES DU DEFAULT'/)
1006  FORMAT(2(2X,'JUSQ''AU POINT ',I3,5X,F5.2, ' MICRONS'))
1009  FORMAT(2X,'JUSQ''AU POINT ',I3,5X,F5.2, ' MICRONS')
  PRINT 1007
1007  FORMAT('OPAS HORIZONTAL DU CALCUL SANS DEFAULT')
CX1006  FORMAT(2(2X,'TILL POINT ',I3,5X,F5.2,' MICRONS'))
CX1009  FORMAT(2X,'TILL POINT ',I3,5X,F5.2,' MICRONS')
  IM = MOD(IN1,2)
  IM = IN1 - IM
  IF(IM.EQ.0) GO TO 460
  PRINT 1006,(NTV(I),TRANSV(NTV(I)),I=1,IM)
460  IF(IM.NE.IN1) PRINT 1009,NTV(IN1),TRANSV(NTV(IN1))
  PRINT 1008,TOTALE,YT,OMEG1,OMEG2,PY,PPX,PY1,IPLAN,IPL
1008  FORMAT('OEPAISSEUR DU CRISTAL SIMULE      ',6X,F7.2,' MICRONS'/
*      'OHAUTEUR DE L'IMAGE SIMULEE          ',7X,F6.2,' MICRONS'/
*      ' LIMITES DE L IMAGE DE ',7X,F8.2,' A ',F8.2,' MICRONS'/

```



```

1      'OPAS VERTICAL DE CALCUL          ',F9.2,' MICRONS'/
2      'OPAS HORIZONTAL REPRESENTE      ',F9.2,' MICRONS'/
3      ' PAS VERTICAL REPRESENTE        ',F9.2,' MICRONS'/
4      'ONOMERE DE PLANS CALCULES      ',I3/
5      ' NOMBRE DE PLANS REPRESENTES   ',I3)

```

DETERMINATION DES CONSTANTES POUR LES CALCULS ULTERIEURS

CONSTANTES DE L'ABSORPTION

```

FOU=-ABSORB*SINALT/COSTET
FACTOR=EXP(-TOTALE*ABSORB/COSALP)
IF(ABS(ALPHA-TET).LT.1.E-03) FOU=0.

```

CONSTANTES DE L'INTEGRATION

```

CR=2.*ONDE/PI
SH=SINDIR*CR
SH1=0.5*SH
CH=COSDIR*CR
CH1=0.5*CH
SO=SINALP*CR
CO=COSALP*CR
C1=CMPLX(1.,0.)
C2=CMPLX(1.,0.)

```

AUTRES CONSTANTES

```

XOM1=OMEG1+TOTALE*TANALP
XOM2=XOR
TBOR=TOTALE*(TANDIR-TANALP)
NBSEC=AINT((XOM2-XOM1)/(PMEAN*KPERF)+0.5)+1
IF(NBSEC.GE.1024+INT(TBOR/PMEAN)) GO TO 5008
WRITE(6,1002)NBSEC

```

```

1002 FORMAT(/' NOMBRES DE SECTIONS CALCULEES PAR PLAN',I4)
NUMPL=0
INDIC=2

```

CALCULS POUR L'A.P.

```

480 DA1=DA(1)
DA2=DA(2)
DA7=DA(7)
DA8=DA(8)

```

CALCUL DES ADRESSES DANS L'A.P.

```

IDIM=1000
IDIM4=4*IDIM
NNR1=38

```

```

NNTRV=NNR1+11*IDIM+5
NNCRAP=NNTRV+2*IDIM+5
NNTRAN=NNCRAP+5
NNNTV=NNTRAN+3*IDIM
NNTRV1=NNNTV+21
NNXD=NNTRV1+21+3*IDIM
NNNT=NNXD+7
NNMEMO=NNNT+22
NNSOMR=NNMEMO+IDIM4+4
NNNBS=NNSOMR+2*IDIM4+7
NNPOI=NNNES+1

```

```

C
C  CALCUL DES CONTANTES POUR L'A.P.
C

```

```

CRAP=PI/(2.*ONDE)
QHIAP(1)=-QHIM(1)
QHIAP(2)= QHIM(2)
QHIAP(3)=-QHIP(1)
QHIAP(4)= QHIP(2)

```

```

C
  CNAP(1)=CN(7)
  CNAP(2)=CN(10)
  CNAP(3)=CN(4)
  CNAP(4)=CN(1)
  CNAP(5)=CN(8)
  CNAP(6)=CN(11)
  CNAP(7)=CN(5)
  CNAP(8)=CN(2)
  CNAP(9)=CN(9)
  CNAP(10)=CN(12)
  CNAP(11)=CN(6)
  CNAP(12)=CN(3)

```

```

C
  COAP(1)=CO3(1)/CO5(1)
  COAP(2)=CO4(1)/CO5(1)
  COAP(3)=CN(4)/CO5(1)
  COAP(4)=CO3(2)/CO5(2)
  COAP(5)=CN(5)/CO5(2)
  COAP(6)=CO4(2)/CO5(2)
  COAP(7)=CO3(3)/CO5(3)
  COAP(8)=CN(6)/CO5(3)
  COAP(9)=CO4(3)/CO5(3)

```

```

C
C  INITIALISATION DES POIDS POUR L'APODISATION :
C

```

```

  IF(KPERF.EQ.1)THEN
    DO 482 I=1,32
482   POI(I)=POI7(I)
  ELSE IF(KPERF.EQ.2)THEN
    DO 483 I=1,32
483   POI(I)=POI15(I)
  ELSE IF(KPERF.EQ.3)THEN
    DO 484 I=1,32
484   POI(I)=POI23(I)

```

```

ELSE
  DO 485 I=1,32
485   POI(I)=POI31(I)
ENDIF

C
C   INITIALISATION DE L'A.P.
C
  CALL APINIT(0,1,ISTAT)
  WRITE(6,*)'   ISTAT = ',ISTAT
  CALL APLLI(5HPL.AP,5,7,1,1)
  CALL APPUT(SO,1,37,2)
  CALL APPUT(CRAP,NNCRAP,5,2)
  CALL APPUT(TRANSV,NNTRAN,3*IDIM,2)
  CALL APPUT(NTV,NNNTV,21,1)
  CALL APPUT(XOM1,NNXD+2,2,2)
  CALL APPUT(PMEAN,NNXD+5,1,2)
  CALL APPUT(FLOAT(KPERF),NNXD+6,1,2)
  CALL APPUT(KPERFO,NNSOMR-1,1,1)
  CALL APPUT(IDEF,NNNBS-6,1,1)
  CALL APPUT(NBSEC,NNNBS,1,1)
  CALL APPUT(POI,NNPOI,32,2)
  CALL APWD

C
C-----
C   DEBUT DE BOUCLE SUR LES PLANS
C-----
C
490  NUMPL=NUMPL+1
C
C   CALCUL DE LA POSITION DE L'IMAGE DIRECTE SUR LA FACE D'ENTREE
C
  XD2=XC+ZC*TANALP
  XD1=XD2-DMLX
  XD2=XD2+DMLX
  IF((IDEF.NE.0).OR.(DMLX.EQ.0.)) GO TO 500

C
C-----
C   CALCUL DU RESEAU D'INTEGRATION AVEC IMAGE DIRECTE
C-----
C
  XSID1=XD1-XC+TBOR-ZC*TANDIR-DMLX
  XSID2=XSID1+4*DMLX
  IF(XSID1.LT.0.)XSID1=0.
  CALL RESO2
  IM=MOD(INN1,2)
  IM=INN1-IM
  WRITE(6,1005)
  WRITE(6,1006)(NTV1(I),TRV1(NTV1(I)),I=1,IM)
  IF(IM.NE.INN1)WRITE(6,1009)NTV1(INN1),TRV1(NTV1(INN1))
  CALL APPUT(TRV1,NNTRV1,3*IDIM,2)
  CALL APPUT(NTV1,NNTRV1+3*IDIM,21,1)
  CALL APWD
500  IERROR=0
C

```

```

C-----
C   CALCUL D'UN PLAN
C-----
C
CALL APPUT(MEMOR,NNMEMO,1,1)
CALL APPUT(XOR,NNXD+4,1,2)
CALL APPUT(XC,NNNBS-5,1,2)
CALL APPUT(ZC,NNNBS-4,1,2)
CALL APPUT(XD1,NNNBS-3,3,2)
CALL APWD
C
CALL PL
CALL APWR
C
CALL APGET(IEERROR,NNSOMR-2,1,1)
CALL APGET(K,NNNBS-7,1,1)
CALL APGET(SOMREF,NNSOMR,K,2)
CALL APWD
C
KUTIL=K
IF(IEERROR.EQ.1)GO TO 5004
IF(KUTIL.GT.1024) GO TO 5000
XOR=XOM2
XC=XC-PX
ZC=ZC-PZ
C
C
C-----
C   SORTIE DU PLAN D'IMAGE
C-----
C
OPEN(1,FILE=NOMFIC,FORM='UNFORMATTED')
IF(NUMPL.EQ.1) GO TO 610
KKK=IMP*(NUMPL-2)+1
DO 600 K=1,KKK
600 READ(1)BIDON
IF(IMP.EQ.1)READ(1)BIDON
610 CALL IMPRES(IO,IMP,KUTIL,NUMPL,SOMREF)
CLOSE(1)
C
C-----
C   ECRITURE DU FICHIER DE SAUVEGARDE
C-----
C
INDIC=INVERS(INDIC)
IF(INDIC.EQ.1) GO TO 570
OPEN(13,FILE=SOV2,FORM='UNFORMATTED')
OPEN(14,FILE=SAUV2,FORM='UNFORMATTED')
GO TO 580
570 OPEN(13,FILE=SOV1,FORM='UNFORMATTED')
OPEN(14,FILE=SAUV1,FORM='UNFORMATTED')
580 WRITE(13)NUMPL
WRITE(13)MAXPL,XOR
CLOSE(13)

```

```

WRITE(14)XC,ZC,XD1,XD2,IDEF,DMLX
WRITE(14)TRANSV,P,Q,NTV,IN1
WRITE(14)TRV1,P1,Q1,NTV1,INN1
WRITE(14)SO,SH,CO,CH,SH1,CH1,C1,C2
WRITE(14)DA,CN,CO3,CO4,CO5,AP1,AP2
WRITE(14)CR,QHIM,QHIP,FACTOR,FOU,KPERFO
WRITE(14)PMEAN,KPERF,NBSEC,PX,PZ,XOM1,XOM2,AFIN
WRITE(14)IO,IMP,IPLAN,IPL,TITRE,STOR1,ONDE
WRITE(14)TANALP,TANDIR,TBOR,EP1,EP2,PINIT
CLOSE(14)

```

```

C
C-----
C   FIN DE BOUCLE SUR LES PLANS
C-----
C

```

```

      IF(NUMPL.LT.IPLAN.AND.NUMPL.LT.MAXPL) GO TO 490
      WRITE(6,1021) KUTIL
1021  FORMAT(////'ONOMBRE DE POINTS PAR PLAN ',I3)
CX1021  FORMAT(////'ONUMBER OF POINTS PER PLANE ',I3)
      IF(IMP.EQ.1) GO TO 630
      IF(NUMPL.LT.IPLAN) GO TO 630
      NUMPL=IPLAN+1
      OPEN(1,FILE=NOMFIC,FORM='UNFORMATTED')
      KKK=IMP*(NUMPL-2)+1
      DO 620 K=1,KKK
620  READ(1)EIDON
      CALL IMPRES(IO,IMP,KUTIL,NUMPL,SOMREF)
      CLOSE(1)
630  WRITE(6,1022)
1022  FORMAT('1')
      CALL APRLSE
      STOP

```

```

C-----
C   TRAITEMENT DES ERREURS
C-----
C

```

```

5000 WRITE(6,5001)
5001 FORMAT(' IMAGE TROP LARGE : PLUS DE 1024 POINTS')
      STOP
5003 FORMAT(' DIMENSION DU TABLEAU SOMREF TROP PETITE')
5004 WRITE(6,5005)
5005 FORMAT(' BUFFER D APODISATION TROP COURT , OU BIEN')
      WRITE(6,5003)
      STOP
5008 WRITE(6,5009)NBSEC
5009 FORMAT(' IMAGE DE LA TRANSLATION TROP GRANDE . NBSEC=',I4)
      STOP
      END

```

```

C-----
C-----
C
      SUBROUTINE ANCALC(C)
C
C   CALCUL DES CONSTANTES DE LA DEFORMATION

```

```

C   REFERENCES      HIRTH ET LOTHE P418
C
COMMON /ANC1/NEW,ZR,ZI,QR(7),QI(7),KRASH
1      /ANC2/PR(3),PI(3),AR(3,3),AI(3,3),EMR(3,3),EMI(3,3),H(3,3)
2      /DAT1/NP(3),NQ(3)/DAT2/ MM(3),NN(3),L3(3,3)
3      /DAT3/L1(6),L2(6)
DIMENSION C(6,6),E(9),G(9),ELR(3,3),ELI(3,3),B(3,3),D(6,6),DR(3,3)
2,DI(3,3)

C
C   -----
C
G(1)=C(5,5)
G(2)=2.0*C(4,5)
G(3)=C(4,4)
G(4)=C(6,6)
G(5)=2.0*C(2,6)
G(6)=C(2,2)
G(7)=C(1,1)
G(8)=2.0*C(1,6)
G(9)=C(6,6)
E(1)=C(5,6)
E(2)=C(2,5)+C(4,6)
E(3)=C(2,4)
E(4)=C(1,5)
E(5)=C(5,6)+C(1,4)
E(6)=C(4,6)
E(7)=C(1,6)
E(8)=C(6,6)+C(1,2)
E(9)=C(2,6)

C
C   -----
C
C   QR  COEFFICIENTS DE L'EQUATION DU 6EME DEGRE
C
DO 50 KP=1,7
QR(KP)=0.0
50  QI(KP)=0.0
DO 12 KQ=1,3
DO 13 KR=1,3
DO 51 KS=1,3
KT=KQ+KR+KS-2
51  QR(KT)=QR(KT)+G(KQ)*G(KR+3)*G(KS+6)+2.0*E(KQ)*E(KR+3)*E(KS+6)-
1  E(KQ)*E(KR)*G(KS+6)-E(KQ+3)*E(KR+3)*G(KS+3)-E(KQ+6)*E(KR+6)*G(KS)
13  CONTINUE
12  CONTINUE
DO 52 KP=1,7
52  QR(KP)=QR(KP)/QR(7)
KRASH=0
NEW=7
ZR=0.1
ZI=1.0
CALL NEWTON
IF (KRASH) 91,61,69
91  PRINT 71

```

```

61  PR(1)=ZR
    PI(1)=ABS(ZI)
    ZI=-ZI
    CALL NEWTON
    IF(KRASH)92,62,69
92  PRINT 71
62  ZR=0.5
    ZI=0.9
    CALL NEWTON
    IF (KRASH) 93,63,69
93  PRINT 71
63  PR(2)=ZR
    PI(2)=ABS (ZI)
    ZI=-ZI
    CALL NEWTON
    IF (KRASH) 94,64,69
94  PRINT 71
64  ZR=-ZR
    CALL NEWTON
    IF (KRASH) 95,65,69
95  PRINT 71
65  PR(3)=ZR
    PI(3)=ABS(ZI)
    ZR=-C(4,5)/C(4,4)
    ZI=SQRT(ABS (C(4,4)*C(5,5)-C(4,5)**2))/C(4,4)
    DO 67 N=1,2
    IF ((ZR-PR(N))**2+(ZI-PI(N))**2-(ZR-PR(N+1))**2-(ZI-PI(N+1))**2)
1 66,67,67
66  Z=PR(N)
    PR(N)=PR(N+1)
    PR(N+1)=Z
    Z=PI(N)
    PI(N)=PI(N+1)
    PI(N+1)=Z
67  CONTINUE
    GO TO 74
69  PRINT 73
73  FORMAT('ORACINES REELLES DANS ANCALC.VERIFIEZ LES CIJ')
CX73 FORMAT('O REAL ROOTS.CHECK THE STIFFNESSES')
    STOP
71  FORMAT('ORESOLUTION DE ANCALC NON CONVERGENTE...',
1'RESULTATS DOUTEUX')
CX71 FORMAT('ONO CONVERGENCE IN THE RESOLUTION OF THE SEXTIC EQUA.')
C
C -----
C
C EQUATION AIK 13-86
C
74  DO 80 K=1,3
    I=NP(K)
    L=NQ(K)
    PRK=PR(K)
    PIK=PI(K)
    SQR=PRK**2-PIK**2

```

```

SQI=2.0*PRK*PIK
DR(1,1)=C(1,1)+PRK*2.0*C(1,6)+SQR*C(6,6)
DR(2,2)=C(6,6)+PRK*2.0*C(2,6)+SQR*C(2,2)
DR(3,3)=C(5,5)+PRK*2.0*C(4,5)+SQR*C(4,4)
DR(1,2)=C(1,6)+PRK*(C(1,2)+C(6,6))+SQR*C(2,6)
DR(2,1)=DR(1,2)
DR(1,3)=C(1,5)+PRK*(C(1,4)+C(5,6))+SQR*C(4,6)
DR(3,1)=DR(1,3)
DR(2,3)=C(5,6)+PRK*(C(4,6)+C(2,5))+SQR*C(2,4)
DR(3,2)=DR(2,3)
DI(1,1)=PIK*2.0*C(1,6)+SQI*C(6,6)
DI(2,2)=PIK*2.0*C(2,6)+SQI*C(2,2)
DI(3,3)=PIK*2.0*C(4,5)+SQI*C(4,4)
DI(1,2)=PIK*(C(1,2)+C(6,6))+SQI*C(2,6)
DI(2,1)=DI(1,2)
DI(1,3)=PIK*(C(1,4)+C(5,6))+SQI*C(4,6)
DI(3,1)=DI(1,3)
DI(2,3)=PIK*(C(4,6)+C(2,5))+SQI*C(2,4)
DI(3,2)=DI(2,3)

```

C
C
C
C
C

RESOLUTION DU SYSTEME LINEAIRE AK 13-87

```

DO 4 J=1,3
M=NP(J)
N=NQ(J)
AR(J,K)=DR(I,M)*DR(L,N)-DI(I,M)*DI(L,N)-DR(I,N)*DR(L,M)
1 +DI(I,N)*DI(L,M)
4 AI(J,K)=DR(I,M)*DI(L,N)+DI(I,M)*DR(L,N)-DR(I,N)*DI(L,M)
1 -DI(I,N)*DR(L,M)
80 CONTINUE
DO 5 J=1,3
NJ=NN(J)
DO 82 K=1,3
XR=0.0
XI=0.0

```

C
C
C
C
C

CALCUL DES BIJK 13-90

```

DO 81 L=1,3
NL=NN(L)
ML=MM(L)
YR=C(NJ,ML)+C(NJ,NL)*PR(K)
YI=C(NJ,NL)*PI(K)
81 XR=XR+YR*AR(L,K)-YI*AI(L,K)
82 XI=XI+YI*AR(L,K)+YR*AI(L,K)
5 CONTINUE
DO 6 J=1,3
J1=NP(J)

```


J2=NQ(J)

C
C
C
C
C
C
C

COEFFICIENTS COMPLEXES DE L'EQUATION 13-89

```

DO 83 K=1,3
  K1=NP(K)
  K2=NQ(K)
  EMR(K,J)=ELR(J1,K1)*ELR(J2,K2)-ELI(J1,K1)*ELI(J2,K2)
  1      -ELR(J1,K2)*ELR(J2,K1)+ELI(J1,K2)*ELI(J2,K1)
83  EMI(K,J)=ELR(J1,K1)*ELI(J2,K2)+ELI(J1,K1)*ELR(J2,K2)
  1      -ELR(J1,K2)*ELI(J2,K1)-ELI(J1,K2)*ELR(J2,K1)
6    CONTINUE
  DELR=0.0
  DELI=0.0
  DO 84 J=1,3
    DELR=DELR+ELR(3,J)*EMR(J,3)-ELI(3,J)*EMI(J,3)
84  DELI=DELI+ELR(3,J)*EMI(J,3)+ELI(3,J)*EMR(J,3)
    AUMR=DELR/(DELR**2+DELI**2)
    AUMI=-DELI/(DELR**2+DELI**2)
    DO 7 J=1,3
      DO 85 K=1,3
        X=EMR(J,K)*AUMR-EMI(J,K)*AUMI
        EMI(J,K)=EMR(J,K)*AUMI+EMI(J,K)*AUMR
85  EMR(J,K)=X
7    CONTINUE
    DO 8 I=1,3
      DO 9 J=1,3
        B(I,J)=0.0
      DO 86 K=1,3
66  B(I,J)=B(I,J)-AR(I,K)*EMI(K,J)-AI(I,K)*EMR(K,J)
9    CONTINUE
8    CONTINUE
    DO 10 I=1,3
      I1=NP(I)
      I2=NQ(I)
      DO 87 J=1,3
        J1=NP(J)
        J2=NQ(J)
87  H(I,J)=B(I1,J1)*B(I2,J2)-B(I1,J2)*B(I2,J1)
10  CONTINUE
      DEL=B(3,1)*H(3,1)+B(3,2)*H(3,2)+B(3,3)*H(3,3)
      DO 11 I=1,3
        DO 88 J=1,3
88  H(I,J)=H(I,J)/DEL
11  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C
C

BLOCK DATA BLK

```

COMMON /DAT1/NP(3),NQ(3)
1      /DAT2/ MM(3),NN(3),L3(3,3)
2      /DAT3/ L1(6),L2(6)
COMMON /DAT4/NR(3),NS(3),NT(3)
COMMON /CONST/PI
COMMON /CDIR/ZONE,PAS,ROCK
COMMON /COPT/OPT(6)
COMMON /CTIME/A,C
COMMON /POICOM/POI7(32),POI15(32),POI23(32),POI31(32)

```

```

C
C  CONST  CONSTANTES GENERALES DU PROGRAMME
C

```

```

DATA NP/2,3,1/,NQ/3,1,2/,MM/1,6,5/,NN/6,2,4/,
1L3/1,6,5,6,2,4,5,4,3/,L1/1,2,3,2,3,1/,L2/1,2,3,3,1,2/
DATA NR/1,3,2/,NS/2,1,3/,NT/3,2,1/
DATA ZONE/15./,PAS/0.5/,PI/3.14159/,A/1.5E-04/,C/6.3/
DATA OPT/0.2,4.,0.1,4.,0.1,8./,ROCK/0.5/
DATA POI7/
S 1.,7.,21.,35.,35.,21.,7.,1.,0.,0.
S,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.
S,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0./
DATA POI15/
S 1.,15.,105.,455.,1365.
S,3003.,5005.,6435.,6435.,5005.
S,3003.,1365.,455.,105.,15.,1.
S,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0./
DATA POI23/
S 1.,23.,253.,1771.,8855.
S,33649.,100947.,245157.,490314.,817190.
S,1144066.,1352078.,1352078.,1144066.,817190.
S,490314.,245157.,100947.,33649.,8855.
S,1771.,253.,23.,1.
S,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0./
DATA POI31/
S 1.,31.,465.,4495.,31465.
S,169911.,736281.,2629575.,7888725.,20160075.
S,44352165.,84672315.,141120525.,206253075.,265182525.
S,300540195.,300540195.,265182525.,206253075.,141120525.
S,84672315.,44352165.,20160075.,7888725.,2629575.
S,736281.,169911.,31465.,4495.,465.,31.,1./
END

```

```

C-----
C-----
C
SUBROUTINE CRIS(OR,A,ANG)
  DIMENSION A(3),ANG(3)
  DIMENSION OR(3,3)

```

```

C
C  LES CARTES SUIVANTES DEPENDENT DES CONVENTIONS DE TRANSFORMATION ENTR
C  REPERE CRISTALLOGRAPHIQUE ET REPERE ORTHONORME ASSOCIE
C
C  PROGRAMME VALABLE POUR LES REPERES ORTHOGONAUX,MONOCLINIQUE STANDART
C  ET HEXAGONAL
C

```

C VALID FOR ORTHOGONAL, HEXAGONAL AND STANDART MONOCLINIC CLASSES

C
DO 10 I=1,3
DO 11 J=1,3
11 CR(I,J)=0.
10 CR(I,I)=A(I)
OR(1,1)=A(1)*SQRT(1.-ANG(2)*ANG(2))
OR(2,2)=OR(2,2)*SQRT(1.-ANG(3)*ANG(3))
OR(1,2)=A(2)*ANG(3)
OR(3,1)=A(1)*ANG(2)
RETURN
END

C-----VERSION--ADELE--FPS100--MAI--1982-----

C-----
C

SUBROUTINE DEFAULT
COMMON /PRIN1/ONDE,TOTALE,AJ,PMEAN
COMMON /PRIN2/COSDIR,SINDIR,COSALP,SINALP,COSALT,SINALT,TANALP,
1 TANDIR,SINTET,SIN2TE
COMMON /DEF2/DA(3,3)/DEF3/CN(12),CO3(3),CO4(3),CO5(3)
COMMON /DEF4/XC,YC,ZC,YT,OMEG1,OMEG2,DISL(3)
COMMON /APCOM1/SO,CO,DA2,DA8,DA1,DA7,SH,CH,SH1,CH1
2,CC2(2),CNAP(12),COAP(9),AP2,AP1,FOU,FACTOR
COMMON /ANC2/PR(3),PI(3),AR(3,3),AI(3,3),EMR(3,3),EMI(3,3),H(3,3)
1 /DAT1/NP(3),NQ(3)
COMMON /CDIR/ZONE,PAS,ROCK
DIMENSION A(3),ANG(3),RN(3),GD(3),B(3),OR(3,3),
1G(3,3),R(3,3),BT(21),CC(6,6),C(6,6),SUR(3),SUI(3),DR(3),DI(3),
2UR(3,3),UI(3,3),VR(3,3),VI(3,3),RF(3),ED(3),DB(3,3),DC(3,3)

C-----

C ENTREE DES DONNEES DU CRISTAL ET DU DEFAULT

C-----

C

READ (5) A,ANG,B,DISL,RN,RF
IF(DISL(2).EQ.0.) DISL(2)=1.E-10
SIGN=1.
IF(DISL(2).LT.0.) SIGN=-1.
DO 10 I=1,3
B(I)=B(I)*SIGN
10 DISL(I)=DISL(I)*SIGN
PRINT 1000,A,ANG,B,DISL,RN,RF
1000 FORMAT(1H0,'PARAMETRES DU CRISTAL'
1/1H ,' A = ', 4PF10.3,' 10(-4) MICRONS '
2/1H ,' B = ', 4PF10.3,' 10(-4) MICRONS '
3/1H ,' C = ', 4PF10.3,' 10(-4) MICRONS '
4/1H ,'COSINUS DES ANGLES ',3(5X,0PF10.3)
5/1H0,'VECTEUR DE BURGERS ',3(5X,F10.3)
5/1H0,'ORIENTATION DE LA DISLOCATION ',3(5X,F10.3)
6/1H0,'NORMALE A LA FACE D'ENTREE ',3(5X,F10.3)
7/1H0,'REFLECTION ETUDIEE ',3(5X,F10.3))
CX1000 FORMAT(1H0,'PARAMETERS OF THE CRYSTAL'
CX 1/1H ,' A = ', 4PF10.3,' 10(-4) MICRONS '
CX 2/1H ,' B = ', 4PF10.3,' 10(-4) MICRONS '

```

CX 3/1H , ' C = ', 4PF10.3, ' 10(-4) MICRONS '
CX 4/1H , 'COS. OF THE ANGLES ',3(5X,OPF10.3)
CX 5/1H0,'BURGERS VECTOR ',3(5X,F10.3)
CX 5/1H0,'DISLOCATION ORIENTATION ',3(5X,F10.3)
CX 6/1H0,'NORMALE TO THE ENTRANCE SURFACE ',3(5X,F7.3)
CX 7/1H0,'REFLECTION ',3(5X,F7.3))
      READ (5)XC,YC,ZC,YT,OMEG1,OMEG2,BT
      WRITE(6,1001) XC,YC,ZC
1001  FORMAT('OPOSITION DU COEUR ',3(5X,F10.3),' MICRONS'
2//1H , 'COEFFICIENTS ELASTIQUES')
CX1001  FORMAT('OPOSITION OF THE CORE ',2(5X,F10.3),'MICRONS')
CX 2//1H , 'ELASTIC STIFFNESSES')

```

```

C
      CALL CRIS(OR,A,ANG)
      CALL NORMA(G,R,A,ANG)
      CALL MATRI(B,OR)
      CALL MATRI (RF,R)
      CALL MATRI(RN,R)
      CALL MATRI(RN,OR)
      CALL MATRI(RF,OR)

```

```

C
C-----
C      CALCUL DES CHANGEMENTS DE REPERE
C      MATRICE DB:      X(I)=DB(I,J)*A(J)
C-----
C

```

```

      SOM=0.
      SON=0.
      SOP=0.
      DO 100 I=1,3
      SOM=SOM+RN(I)*RN(I)
100    SON=SON-RN(I)*RF(I)
      DO 101 I=1,3
      DB(3,I)=RN(I)/SQRT(SOM)
      DB(1,I)=-RF(I)-RN(I)*SON/SOM
101    SOP=SOP+DB(1,I)*DB(1,I)
      SOP=SQRT(SOP)
      SOM=0.

```

```

C
C-----
C      MATRICE DA:      DC(I)=DA(I,J)*X(J)
C-----
C

```

```

      DO 102 I=1,3
      DB(1,I)=DB(1,I)/SOP
      DA(3,I)=DISL(I)
102    SOM=SOM+DA(3,I)*DA(3,I)
      IF(DISL(1).EQ.0..AND.DISL(3).EQ.0.) GOTO 104
      SOP=SQRT(DISL(1)*DISL(1)+DISL(3)*DISL(3))
      DA(1,1)= DISL(3)/SOP
      DA(1,2)=0.
      DA(1,3)=-DISL(1)/SOP
      GOTO 105
104    DA(1,1)=1.

```

```

      DA(1,2)=0.
      DA(1,3)=0.
105    CONTINUE
      DO 106 I=1,3
106    DA(3,I)=DA(3,I)/SQRT(SOM)
      DO 107 I=1,3
      M=NP(I)
      N=NQ(I)
      DB(2,I)=DB(1,N)*DB(3,M)-DB(1,M)*DB(3,N)
107    DA(2,I)=DA(1,N)*DA(3,M)-DA(1,M)*DA(3,N)
C
C-----
C    MATRICE DC:      DC(I)=DC(I,J)*A(J)
C-----
C
      DO 108 I=1,3
      DO 108 J=1,3
      DC(I,J)=0.
      DO 108 K=1,3
108    DC(I,J)=DC(I,J)+DA(I,K)*DB(K,J)
C
C-----
C    CALCULS D'ELASTICITE
C-----
C
      DO 110 M=1,6
      DO 110 N=1,6
      MN=M+(12-N)*(N-1)/2
      CC(M,N)=BT(MN)
110    CC(N,M)=BT(MN)
      DO 111 I=1,6
111    PRINT 1103,(CC(I,J),J=1,I)
1103  FORMAT(1H ,6F10.3)
C
C-----
C    FIN DES CALCULS D'ENTREE
C    A CE STADE SONT EXPRIMES DANS LE REPERE ORTHONORME MACROSCOPIQUE
C      -LA DIRECTION DE LA DISLOCATION
C    DANS LE REPERE ORTHONORME ASSOCIE A LA MAILLE ELEMENTAIRE
C      -LA NORMALE A LA FACE D'ENTREE  RN
C      -LE VECTEUR RECIPROQUE H  RF
C      -LE VECTEUR DE BURGERS  B
C      -LE TENSEUR D'ELASTICITE  CC
C-----
C
C    ROTATION DU TENSEUR
C
      CALL TENS (CC,C,DC)
      DO 120 I=1,3
      GD(I)=-RF(I)
C
C    ATTENTION E NORMALISE POUR L'INTEGRATION COMME SUIV
C    -----
C

```

```

120   BD(I)=B(I)*ONDE/3.14159
      CONTINUE
      CALL MATRI(GD,DC)
      CALL MATRI(BD,DC)

```

C

```

C-----
C  RESOLUTION DU SYSTEME HIRTH ET LOTHE
C-----
C

```

```

      CALL ANCALC(C)
      DO 200 JA=1,3
        SUR(JA)=0.0
        SUI(JA)=0.0
        DO 27 K=1,3
          SUR(JA)=SUR(JA)+GD(K)*AR(K,JA)
          SUI(JA)=SUI(JA)+GD(K)*AI(K,JA)
        27 CONTINUE
        DR(JA)=SUR(JA)*PR(JA)-SUI(JA)*PI(JA)
        DI(JA)=SUR(JA)*PI(JA)+SUI(JA)*PR(JA)
      200 CONTINUE
        DO 202 JA=1,3
          DO 203 L=1,3
            UR(JA,L)=0.0
            UI(JA,L)=0.0
            DO 204 J=1,3
              UR(JA,L)=UR(JA,L)+EMR(JA,J)*H(J,L)
              204 UI(JA,L)=UI(JA,L)+EMI(JA,J)*H(J,L)
            203 CONTINUE
          202 CONTINUE
            DO 205 JA=1,3
              DO 206 L=1,3
                VR(JA,L)=DR(JA)*UR(JA,L)-DI(JA)*UI(JA,L)
                206 VI(JA,L)=DR(JA)*UI(JA,L)+DI(JA)*UR(JA,L)
              205 CONTINUE

```

C

```

C  CONSTANTES CN(J)
C

```

```

      DO 207 JA=1,3
        DO 208 L=1,3
          208 UI(JA,L)=VR(JA,L)*PR(JA)+VI(JA,L)*PI(JA)
        207 CONTINUE
          DO 209 J=1,3
            CN(J+6)=PR(J)
            CN(J+9)=PI(J)**2
            CN(J)=0.0
            CN(J+3)=0.0
            DO 210 L=1,3
              CN(J)=CN(J)+VR(J,L)*BD(L)
              210 CN(J+3)=CN(J+3)+UI(J,L)*BD(L)
            209 CONTINUE

```

C

```

C-----
C  DETERMINATION DES CONSTANTES POUR LE CALCUL DE D/DSH(H.U)
C-----
C

```

```

C
DO 220 I=1,3
CO3(I)=CN(I)*(CN(I+6)**2+CN(I+9))
CO4(I)=2.*CN(I+3)*CN(I+6)
CO5(I)=CN(I+6)**2+CN(I+9)
220 CONTINUE
AP1=DA(1,3)*COSDIR-DA(1,1)*SINDIR
AP2=DA(2,3)*COSDIR-DA(2,1)*SINDIR
RETURN
END

C-----VERSION--ADELE--FPS100--MAI--1982-----
C-----
C   CALCUL DE LA DEMI-LARGEUR PROJETEE DE L'IMAGE DIRECTE DMLX
C-----
C
SUBROUTINE DIRECT(DTET,DMLX)
C
COMMON /PRIN2/COSDIR,SINDIR,COSALP,SINALP,COSALT,SINALT,TANALP,
1    TANDIR,SINTET,SIN2TE
COMMON /DEF2/DA(9)
COMMON /DEF3/CN(12),CO3(3),CO4(3),CO5(3)
COMMON /APCOM1/SO,CO,DA2,DA8,DA1,DA7,SH,CH,SH1,CH1
2,CC2(2),CNAP(12),COAP(9),AP2,AP1,FOU,FACTOR
COMMON /CDIR/ZONE,PAS,ROCK
COMMON /DAT4/NR(3),NS(3),NT(3)
DIMENSION CO1(3),CO2(3),Y(2)

C
C-----
C   ROCK COEFFICIENT POUR ESTIMER LA ZONE DE CREATION DE L'IMAGE
C   DIRECTE (VOIR MILTAT AND BOWEN, J.APPL.CRYST.(1977))
C
C   LA ZONE D'IMAGE EXPLOREE EST AU MAXIMUM +- ZONE
C   AVEC UN PAS D'ECHANTILLONAGE PAS
C-----
C
NZ=INT(ZONE/PAS+0.5)+1
NX=2*NZ-1
ZONX=ZONE*(1.+TANALP)
C
DO 10 I1=1,NZ
XD=ZONX-FLOAT(I1-1)*PAS
DO 10 I2=1,NX
Z=-ZONE+FLOAT(I2-1)*PAS
X=XD-TANALP*FLOAT(I2-1)*PAS
X1=DA(1)*X+DA(7)*Z
X2=DA(2)*X+DA(8)*Z
IF(ABS(X2).LT.0.1E-10) GOTO 10
X4=X2*X2

C
C-----
C   CALCUL DE D/DSH(H.U)
C-----
C
DH1X1=0.

```

```

DH1X2=0.
DO 11 I=1,3
CO1(I)= X1+CN(I+6)*X2
CO2(I)=X2*CO3(I)
C
C   DERIVEE PAR RAPPORT A X2
C
DH1X2=DH1X2+(CN(I)*X1+CN(I+3)*X2)/(CO1(I)**2+CN(I+9)*X4)
C
C   DERIVEE PAR RAPPORT A X1
C
DH1X1=DH1X1+(CN(I+3)*X1-CO2(I)+X2*CO4(I))/((
1CO1(I)**2+CN(I+9)*X4)*CO5(I))
11 CONTINUE
DSH=DH1X1*AP1+DH1X2*AP2
C
C-----
C   DETERMINATION DES LIMITES DE L'IMAGE DIRECTE
C-----
C
IF(ABS(DSH).GE.DTET) GOTO 20
10 CONTINUE
DMLX=0.
WRITE(6,1000)
1000 FORMAT('OIMAGE DIRECTE INVISIBLE')
CX1000 FORMAT('ODIRECT IMAGE IS INVISIBLE')
RETURN
C
C-----
C   CALCUL DE LA DEMI-LARGEUR PROJETEE DE L'IMAGE DIRECTE : DMLX
C-----
C
20 X1=-ABS(Z)*TANALP
X2=ABS(Z)*TANDIR
DMLX=ABS(X)+AMAX1(X1,X2)
30 WRITE(6,2000)DMLX
2000 FORMAT(/,' DEMI LARGEUR DE L IMAGE DIRECTE DMLX=',E12.3,
S' MICRONS',/)
RETURN
END
C-----
C   --VERSION--ADELE--JANVIER--1982-----
C-----
C   IMPRES EFFECTUE LA SORTIE DES PLANS CALCULES ET
C   INTERPOLLES SUR L'UNITE 1
C-----
C
SUBROUTINE IMPRES(IO,IMP,JJ,NUMPL,STOR)
COMMON /IMPA/NL,IPLAN,STOR1(1024)
COMMON /IMPB/TITRE
CHARACTER * 4 TITRE(18)
INTEGER * 4 JJ,NL
DIMENSION STOR2(1024),STOR3(1024),SORTIE(3,10),STOR(1024)
DATA SORTIE/30*0./
C

```



```

C-----
C   SORTIE DU DERNIER PLAN CALCULE
C
    IF(NUMPL.EQ.IPLAN+1) GO TO 200
    IF(NUMPL.EQ.1) WRITE(1) TITRE,JJ,NL
    IF(IMP.EQ.1) GO TO 200
    IF(NUMPL.EQ.1) GO TO 190
C
C-----
C   INTERPOLLATION
C-----
C
    R1=1./FLOAT(IMP)
    R2=1.-R1
    DO 70 I=1,JJ
    STOR2(I)=R2*STOR1(I)+R1*STOR(I)
70  IF(IMP.EQ.3) STOR3(I)=R1*STOR1(I)+R2*STOR(I)
C
C   SORTIE DES PLANS INTERPOLLES ET ENREGISTRE
C
    WRITE(1) (STOR1(I),I=1,JJ)
    WRITE(1) (STOR2(I),I=1,JJ)
    IF(IMP.EQ.3) WRITE(1) (STOR3(I),I=1,JJ)
    IF(IO.EQ.0) GO TO 180
80  J=0
    NOMBRE=-10
    DO 90 K=1,JJ
    J=J+1
    M=MOD(J-1,10)+1
    SORTIE(1,M)=STOR1(J)
    SORTIE(2,M)=STOR2(J)
    SORTIE(3,M)=STOR3(J)
    IF(M.LT.10) GOTO 90
    NOMBRE=NOMBRE+10
100  FORMAT(1H ,I4)
101  FORMAT(' R',10E11.4)
    WRITE (IO,100)NOMBRE
    WRITE(IO,101) (SORTIE(1,I),I=1,M)
    IF(IMP.GT.1) WRITE (IO,101)(SORTIE(2,I),I=1,M)
    IF(IMP.EQ.3) WRITE(IO,101)(SORTIE(3,I),I=1,M)
90  CONTINUE
    IF(M.EQ.10) GOTO 180
    NOMBRE=NOMBRE+10
    WRITE (IO,100)NOMBRE
    WRITE(IO,101) (SORTIE(1,I),I=1,M)
    IF(IMP.GT.1) WRITE (IO,101)(SORTIE(2,I),I=1,M)
    IF(IMP.EQ.3) WRITE(IO,101)(SORTIE(3,I),I=1,M)
180  CONTINUE
C
C   ENREGISTREMENT DU PLAN
C
190  DO 191 I=1,JJ
191  STOR1(I)=STOR(I)
    RETURN

```

```

C
C   SORTIE DU PLAN
C
200  CONTINUE
      WRITE(1) (STOR(J),J=1,JJ)
      IF(IO.EQ.0) RETURN
      DO 201 I=1,JJ
      STOR1(I)=STOR(I)
      STOR2(I)=0.
201  STOR3(I)=0.
      GO TO 80
      END

C
C   -----
C   -----
C
C
      SUBROUTINE MATRI(A,DD)
      DIMENSION A(3),DD(3,3),C(3)
C   CE PROGRAMME CALCULE LA TRANSFORMATION MATRICIELLE
C   B(I)=DD(I,J)*A(J)
      DO 2 I=1,3
      C(I)=0.
      DO 1 J=1,3
1     C(I)=C(I)+DD(I,J)*A(J)
2     CONTINUE
      DO 3 I=1,3
3     A(I)=C(I)
      RETURN
      END

C
C   -----
C   -----
C
C
      SUBROUTINE NEWTON
C   RESOLUTION DE L'EQUATION DU 6E DEGRE
C
C
      COMMON /ANC1/NEW,ZR,ZI,QR(7),QI(7),KRASH
      LASTIM=0
      DO 6 KOUNT=1,70
      XR=0.0
      XI=0.0
      YR=0.0
      YI=0.0
      DO 3 J=1,NEW
      TR=ZR*YR-ZI*YI+XR
      YI=ZR*YI+ZI*YR+XI
      YR=TR
      M=NEW+1-J
      TR=ZR*XR-ZI*XI+QR(M)

```

```

      TI=ZR*XI+ZI*XR+QI(M)
      IF (LASTIM) 1,2,1
1     QR(M)=XR
      QI(M)=XI
2     XR=TR
3     XI=TI
      IF (LASTIM) 7,4,7
4     F=1.0/(YR**2+YI**2)
      TR=F*(XR*YR+XI*YI)
      TI=F*(XI*YR-XR*YI)
      ZR=ZR-TR
      ZI=ZI-TI
      IF ((TR**2+TI**2)/(ZR**2+ZI**2)-1.0E-12) 5,5,6
5     LASTIM=1
6     CONTINUE
      KRASH=-70
      RETURN
7     IF (ABS (ZR)-1.0E5*ABS (ZI)) 9,9,8
8     KRASH=8-NEW
9     NEW=NEW-1
      RETURN
      END

C
C -----
C -----
C
C
C
C
      SUBROUTINE NORMA(G,R,A,ANG)
      COMMON /DAT1/NP(3),NQ(3)
      DIMENSION A(3),ANG(3)
      DIMENSION G(3,3),R(3,3)

C
C CE PROGRAMME CALCULE LES TENSEURS METRIQUES COVARIANTS ET CONTREVARIA
C
C TENSEUR GIJ DIRECT
C
      DO 1 I=1,3
1     G(I,I)=A(I)*A(I)
      G(1,2)=A(1)*A(2)*ANG(3)
      G(1,3)=A(1)*A(3)*ANG(2)
      G(2,3)=A(2)*A(3)*ANG(1)
      G(2,1)=G(1,2)
      G(3,1)=G(1,3)
      G(3,2)=G(2,3)

C
C TENSEUR RIJ INVERSE
C
      DET=0.
      DO 2 I=1,3
      J=NP(I)
      K=NQ(I)
2     DET=DET+G(I,1)*G(J,2)*G(K,3)-G(I,1)*G(K,2)*G(J,3)
      IF(DET.LE.0.) GOTO 100
      DO 3 I=1,3

```

```

      IA=NP(I)
      IB=NQ(I)
      DO 3 J=1,3
      JA=NP(J)
      JB=NQ(J)
3      R(I,J)=(G(JA,IA)*G(JB,IB)-G(JB,IA)*G(JA,IB))/DET
      RETURN
100    PRINT 101
101    FORMAT('OERREUR DANS LE TENSEUR METRIQUE',
1' VERIFIEZ LES PARAMETRES DU CRISTAL')
CX101  FORMAT('OWRONG METRIC TENSOR, CHECK UNIT CELL')
      STOP
      END
      SUBROUTINE RES(TTV, TXSI, NMIN, NMAX, PAS)
C
C      UTILITAIRE DE RESEAU
C
      COMMON /RES1/TRANSV(1000),P(1000),Q(1000),NTV(20),IN1
      INTEGER *2 NTV,IN1
      IN1 = IN1+1
      N1 = INT((TXSI-TTV)/PAS)
      IF(N1.EQ.0) N1=1
      TTV = TTV+FLOAT(N1)*PAS
      NMIN = NMAX+1
      NMAX = NMAX+N1
      NTV(IN1) = NMAX
      IF(NMAX.GT.997) GOTO 1000
      DO 10 I = NMIN,NMAX
10      TRANSV(I) = PAS
      RETURN
1000   PRINT 1001
1001   FORMAT('O NOMBRE MAXIMUM DE POINTS DANS LE MAILLAGE DEPASSE')
CX1001 FORMAT('O TO MANY POINTS IN THE NETWORK OF INTEGRATION')
      STOP
      END
C-----VERSION--ADELE--JANVIER--1982-----
C-----
C      CE SOUS PROGRAMME CREE LE RESEAU D'INTEGRATION DES EQUATIONS
C      DE TAKAGI.IL TRAVAILLE AVEC LE SPG UTILITAIRE RES
C-----
      SUBROUTINE RESEAU
C
C      AJ = 4/AJ**2  DANS LES CALCULS THEORIQUES
C
      COMMON /RES1/TRANSV(1000),P(1000),Q(1000),NTV(20),IN1
      COMMON /PRIN1/ONDE,EPAIS,AJ,PMEAN
      COMMON /PRIN2/COSDIR,SINDIR,COSALP,SINALP,COSALT,SINALT,
2      TANALP,TANDIR,SINTET,SIN2TE
      COMMON /RESPRI/XSID1,XSID2,EP1,EP2
      COMMON /CRES/PINIT,AFIN
      COMMON /CONST/PI
      INTEGER *2 NTV,IN1
      DIMENSION UO(100),DXSI(199),XSI(200)
C

```

```

C-----
C   CALCUL APPROXIMATIF DES ZEROS DE JO
C-----
C
      U0(1) = 0.
      U0(2) = 2.4
      DO 1 I = 3,100
1      U0(I) = (4.*FLOAT(I) - 5.)*PI/4.
C
C-----
C   RECHERCHE DES DISTANCES ENTRE ABSCISSES CORRESPONDANTES
C   SUE LA FACE DE SORTIE ( REPERE MOBILE )
C-----
C
      EPO = TANDIR-TANALP
      IM1 = 0
      EP1 = EPAIS*(TANDIR-TANALP)
      EP1 = EP1*EP1
      EP2 = -EPAIS*(TANDIR+TANALP)*0.5
10     IM1 = IM1 + 1
      IF(IM1.GT.100) GOTO 1000
      U0(IM1) = -U0(IM1)*U0(IM1)*AJ + EP1
      IF(U0(IM1).LT.0.) GOTO 15
      XSI(IM1) = EP2 + 0.5*SQRT(U0(IM1))
      DXSI(IM1) = EP2-0.5*SQRT(U0(IM1))
      GO TO 10
15     IM1 = IM1-1
      DO 11 J = 1,IM1
11     XSI(IM1 + J) = DXSI(IM1-J+1)
      IM = 2*IM1-1
      DO 12 J = 1,IM
12     DXSI(J) = XSI(J)-XSI(J + 1)
C
C-----
C   ECHANTILLONAGE DES PAS SUR LA FACE DE SORTIE
C   PAS DE CALCUL PAS = PINIT,2*PINIT,4*PINIT ...
C   JUSQU'A 2*PMEAN
C   TEST SUR LA VARIATION DE DXSI(I) AUTOMATIQUE POUR CHOISIR
C   CE PAS PAR VARIATION DE ALPHA = AINIT,2*ALPHA,2*2ALPHA...
C   JUSQU'A CE QUE 2*PMEAN SOIT ATTEINT.
C   ECHANTILLONAGE DISYMETRIQUE SERRE VERS SO ET PLUS LACHE
C   VERS SH.
C-----
C   1) PREMIERE MOITIE PRES DE SO
C
      TXSI = 0.
      TTV = 0.
      ALPHA = 1.
      NMAX = 1
      IN1 = 0
      PRINT 900
900   FORMAT('OSEQUENCE DES PAS DE CALCUL SUR LA FACE DE SORTIE')
CX900  FORMAT('OREPARTITION OF CALCULATED POINTS ON THE EXIT SURFACE')
C

```

```

PAS = PINIT
TRANSV(1) = PINIT
SI = 1.
DO 100 I = 1,IM1
TXSI = TXSI + DXSI(I)
IF(SI*DXSI(I).LT.SI*ALPHA) GOTO 100
CALL RES(TTV,TXSI,NMIN,NMAX,PAS)
PAS = PAS*2.
IF(ALPHA.GE.AFIN) GOTO 50
ALPHA=2.*ALPHA
GO TO 100
50  SI=-1.
100 CONTINUE
C
C-----
C  2)  DEUXIEME MOITIE .PAS MINIMUM PMEAN.
C-----
C
IF(DXSI(IM1).LT.AFIN) GOTO 160
IF(IM1.EQ.1) GOTO 160
I1 = IM1 + 1
DO 150 I = I1,IM
TXSI=TXSI+DXSI(I)
IF(DXSI(I).GT.1.5*ALPHA) GOTO 150
CALL RES(TTV,TXSI,NMIN,NMAX,PAS)
PAS = PMEAN
GO TO 160
150 CONTINUE
160 TXSI=XSI(1)-XSI(IM+1)
CALL RES(TTV,TXSI,NMIN,NMAX,PAS)
C
C-----
C  ECHANTILLONAGE EGAL A PINIT LE LONG DE SH
C-----
C
INN2 = INT(TRANSV(NMAX)/PINIT+0.1)
IF(INN2.EQ.1) GOTO 180
C
C  TEST POUR LE CAS OU LA DERNIERE ZONE CONTIEND 1 SEUL POINT
C
IF(NMAX-1.EQ.NTV(IN1-1)) GO TO 165
NTV(IN1) = NMAX - 1
IN1 = IN1 + 1
165 NTV(IN1) = NMAX + INN2 - 1
DO 170 I =1,INN2
170 TRANSV(NMAX+I-1) = PINIT
NMAX = NMAX + INN2 -1
180 CONTINUE
C
C  ON RAJOUTE UN PAS PINIT A DROITE DU TRIANGLE DE BORMANN
C
NTV(IN1)=NTV(IN1)+1
NMAX=NMAX+1
TRANSV(NMAX)=PINIT

```

```

C
C-----
C    CALCUL DES PAS OBLIQUES P ET Q
C-----
C
    EP1 = EPO*COSALP
    EP2 = EPO*COSDIR
    DO 200 I = 1,NMAX
    P(NMAX-I+1) = TRANSV(I)/EP1
200  Q(I)=TRANSV(I)/EP2
C
C    EPAISSEUR DU CRISTAL AJUSTEE A LA VALEUR DU PAS DE CALCUL
C
    EPAIS = TTV/EPO
    RETURN
C
C-----
C    TRAITEMENT DES ERREURS
C-----
C
1000  PRINT 1100
1100  FORMAT('O CRISTAL TROP EPAIS,IL Y A PLUS DE 200 FRANGES'/
1'O SUR LA FACE DE SORTIE')
CX1100  FORMAT('O CRYSTAL TO THICK,MORE THAN 200 FRINGES')
    STOP
    END
C-----VERSION--ADELE--JANVIER--1982-----
C-----
C    RESO2 CALCULE LE RESEAU D'INTEGRATION AVEC IMAGE DIRECTE
C-----
C
    SUBROUTINE RESO2
    COMMON /RES1/TRANSV(1000),P(1000),Q(1000),NTV(20),IN1
    COMMON /RES2/TRV1(1000),P1(1000),Q1(1000),NTV1(20),INN1
    COMMON /RESPRI/XSID1,XSID2,EP1,EP2
    COMMON /CRES/PINIT,AFIN
    INTEGER *2 NTV,IN1,NTV1,INN1
C
C-----
C    1) RECHERCHE DES LIMITES DE L'IMAGE DIRECTE
C-----
C
    INN2 = 0
    NMAX=NTV(IN1)
    INN3 = NMAX
    TXSI = 0.
    DO 300 I =1,NMAX
    TXSI = TXSI + TRANSV(I)
    IF(TXSI.LE.XSID1) INN2 = I
    IF(TXSI.GT.XSID2) GOTO 310
300  CONTINUE
    I=NMAX
310  CONTINUE
    IF(INN2.EQ.0) INN2=1

```

```

C
  INN3 = I
  IM2 = INN3 - INN2 + 1
  IF(INN3.LE.NTV(1)) GO TO 360
  IF(INN2.GE.NTV(IN1-1)) GO TO 360
C
C   CALCUL DU NOMBRE DE PAS DU NOUVEAU RESEAU
C
  TXSI = 0.
  DO 320 IM = INN2,INN3
320  TXSI = TXSI + TRANSV(IM)
      IM = INT(TXSI/PINIT+0.2)
      IMD = IM - IM2
      NMAX1 = NMAX + IMD
      IF(NMAX1.GT.1000) GOTO 1200
C
C-----
C   2) CALCUL DU RESEAU AVEC IMAGE DIRECTE
C   DECALAGE DE TRANSV ET NTV DANS TRV1 ET NTV1
C-----
C
  IM1 = 0
  DO 330 I = 1,NMAX
  IF(I.GE.INN2) IM1 = IMD
330  TRV1(I + IM1) = TRANSV(I)
      DO 331 I = 1,IM
331  TRV1(I + INN2 - 1) = PINIT
      PAS = PINIT
      INN1 = 0
      DO 340 I = 1,NMAX1
      IF(TRV1(I).EQ.PAS) GOTO 340
      INN1 = INN1 + 1
      NTV1(INN1) = I - 1
      PAS = TRV1(I)
340  CONTINUE
      INN1 = INN1 + 1
      NTV1(INN1) = NMAX1
C
C   CALCUL DES PAS OBLIQUES P1 ET Q1
C
  DO 350 I = 1,NMAX1
  P1(NMAX1-I+1) = TRV1(I)/EP1
350  Q1(I) = TRV1(I)/EP2
      RETURN
C
C-----
C   SI L'IMAGE DIRECTE TOMBE DANS UNE ZONE DEJA RAFINEE
C   ON RECOPIE L'ANCIEN RESEAU DANS LE NOUVEAU
C-----
C
360  NMAX1=NMAX
      DO 370 I=1,NMAX1
      TRV1(I)=TRANSV(I)
      P1(I)=P(I)

```



```

370 Q1(I)=Q(I)
    INN1=INN1
    DO 380 I=1,INN1
380 NTV1(I)=NTV(I)
    RETURN
C
C-----
C   TRAITEMENT DES ERREURS
C-----
C
1200 WRITE(6,1201)
1201 FORMAT('O NOMBRE MAXIMUM DE PAS DEPASSE DANS LES PLANS DE ',
1      'L''IMAGE DIRECTE')
CX1201 FORMAT('O TO MANY STEPS IN THE PLANES OF THE DIRECT IMAGE')
    STOP
    END
C
C-----
C-----
C
C   SUBROUTINE TENS(D,C,DC)
C
C   ROTATION D'UN TENSEUR D'ORDRE 4
C
    DIMENSION C(6,6),D(6,6),DC(3,3)
    COMMON /DAT2/MM(3),NN(3),L3(3,3)/DAT3/L1(6),L2(6)
    DO 3 M=1,6
    I=L1(M)
    J=L2(M)
    DO 34 N=1,M
    K=L1(N)
    L=L2(N)
    X=0.0
    DO 33 LP=1,3
    Y=0.0
    DO 32 LQ=1,3
    LT=L3(LP,LQ)
32  Y=Y+DC(J,LQ)*
1    (DC(K,1)*(DC(L,1)*D(LT,1)+DC(L,2)*D(LT,6)+DC(L,3)*D(LT,5))
2    +DC(K,2)*(DC(L,1)*D(LT,6)+DC(L,2)*D(LT,2)+DC(L,3)*D(LT,4))
3    +DC(K,3)*(DC(L,1)*D(LT,5)+DC(L,2)*D(LT,4)+DC(L,3)*D(LT,3)))
33  X=X+DC(I,LP)*Y
    C(M,N)=X
34  C(N,M)=X
3    CONTINUE
    RETURN
    END

```

```

C-----
C   PROGRAMME CONVERSATIONEL INIT                      FEVRIER 1982
C   SERT A INITIALISER OU MODIFIER LES DONNEES POUR ADELE
C
C   UNITE 12 FICHER SOV1
C   UNITE 13 FICHER SOV2
C   UNITE 14 ECRITURE DU NOUVEAU FICHER DE DONNEES
C   UNITE 15 LECTURE ANCIEN FICHER SI NECESSAIRE
C-----
C
C   DIMENSION QHIM(2),QHIP(2),A(3),ANG(3),B(3),DISL(3),RN(3)
C   DIMENSION RF(3),BT(21)
C   INTEGER *2 KPERFO,IDEF
C   CHARACTER *3 RECONS
C   CHARACTER *4 TITRE(18)
C   CHARACTER *8 NOM(29),MODIF,NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2
C   DATA NOM/'TITRE','KPERFO','IO','PZY','IMP','IDEF','IOPT','ONDE',
S      'TETA','ALPHA','ABSORB','TOTALE','QHIM','QHIP','A',
S      'ANG','B','DISL','RN','RF','XC','YC','ZC','YT',
S      'OMEG1','OMEG2','BT','NOMFIC','NON'/
C   DATA PI/3.141592654/
C   DATA NOMFIC/'NOMFIC'/,SOV1/'SOV1'/,SOV2/'SOV2'/
C   DATA SAUV1/'SAUV1'/,SAUV2/'SAUV2'/
C
C-----
C
C   WRITE(6,2000)
C   READ(5,2001)RECONS
C   IF(RECONS.EQ.'OUI') GO TO 10
C   WRITE(6,2002)
C   READ(5,2001)RECONS
C   IF(RECONS.EQ.'NON') GO TO 50
C
C-----
C   CREATION D'UN FICHER ENTIEREMENT NOUVEAU
C   ENTREE DES DONNEES UNE PAR UNE DANS L'ORDRE
C-----
C
C   WRITE(6,1001)
C   READ(5,2003)TITRE
C   WRITE(6,1002)
C   READ(5,*)KPERFO
C   WRITE(6,1003)
C   READ(5,*)IO
C   WRITE(6,1004)
C   READ(5,*)PZY
C   WRITE(6,1005)
C   READ(5,*)IMP
C   WRITE(6,1006)
C   READ(5,*)IDEF
C   WRITE(6,1007)
C   READ(5,*)IOPT
C   WRITE(6,1008)
C   READ(5,*)ONDE

```

```

WRITE(6,1009)
READ(5,*)TETA
WRITE(6,1010)
READ(5,*)ALPHA
WRITE(6,1011)
READ(5,*)ABSORB
WRITE(6,1012)
READ(5,*)TOTALE
WRITE(6,1013)
READ(5,*)QHIM
WRITE(6,1014)
READ(5,*)QHIF
WRITE(6,1015)
READ(5,*)A
WRITE(6,1016)
READ(5,*)ANG
WRITE(6,1017)
READ(5,*)E
WRITE(6,1018)
READ(5,*)DISL
WRITE(6,1019)
READ(5,*)RN
WRITE(6,1020)
READ(5,*)RF
WRITE(6,1021)
READ(5,*)XC
WRITE(6,1022)
READ(5,*)YC
WRITE(6,1023)
READ(5,*)ZC
WRITE(6,1024)
READ(5,*)YT
WRITE(6,1025)
READ(5,*)OMEG1
WRITE(6,1026)
READ(5,*)OMEG2
WRITE(6,1027)
READ(5,*)BT
5 WRITE(6,1028)
  READ(5,2021)NOMFIC
  WRITE(6,1029)
  READ(5,2021)SOV1
  WRITE(6,1030)
  READ(5,2021)SOV2
  WRITE(6,1031)
  READ(5,2021)SAUV1
  WRITE(6,1032)
  READ(5,2021)SAUV2
GO TO 20

```

C

C-----

C

LECTURE DU FICHIER DEJA EXISTANT

C-----

C

```

10 READ(15)NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2
   READ(15)TITRE,KPERFO,IO,PZY,IMP,IDEF,IOPT
   READ(15)ONDE,TETA,ALPHA,ABSORB,TOTALE,QHIM,QHIP
   READ(15)A,ANG,B,DISL,RN,RF
   READ(15)XC,YC,ZC,YT,OMEG1,OMEG2,BT

```

C

C-----

C SORTIE DES DONNEES ACTUELLES SUR LE TERMINAL

C-----

C

```

20 WRITE(6,2004)
   WRITE(6,2005)TITRE
   WRITE(6,2006)KPERFO,IO,PZY,IMP,IDEF,IOPT
   WRITE(6,2007)ONDE,ABSORB
   WRITE(6,2008)TETA,ALPHA
   WRITE(6,2009)QHIM,QHIP
   WRITE(6,2010)A
   WRITE(6,2011)ANG
   WRITE(6,2012)B
   WRITE(6,2013)DISL
   WRITE(6,2014)RN
   WRITE(6,2015)RF
   WRITE(6,2016)XC,YC,ZC
   WRITE(6,2017)TOTALE,YT
   WRITE(6,2018)OMEG1,OMEG2
   WRITE(6,2019)BT
   WRITE(6,2026)NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2

```

C

C-----

C MODIFICATION D'UNE DONNEE

C-----

C

```

WRITE(6,2020)
READ(5,2021)MODIF
IF(MODIF.EQ.NOM(29)) GO TO 30
WRITE(6,2022)MODIF
IF(MODIF.EQ.NOM(1)) READ(5,2003)TITRE
IF(MODIF.EQ.NOM(2)) READ(5,*) KPERFO
IF(MODIF.EQ.NOM(3)) READ(5,*) IO
IF(MODIF.EQ.NOM(4)) READ(5,*) PZY
IF(MODIF.EQ.NOM(5)) READ(5,*) IMP
IF(MODIF.EQ.NOM(6)) READ(5,*) IDEF
IF(MODIF.EQ.NOM(7)) READ(5,*) IOPT
IF(MODIF.EQ.NOM(8)) READ(5,*) ONDE
IF(MODIF.EQ.NOM(9)) READ(5,*) TETA
IF(MODIF.EQ.NOM(10)) READ(5,*) ALPHA
IF(MODIF.EQ.NOM(11)) READ(5,*) ABSORB
IF(MODIF.EQ.NOM(12)) READ(5,*) TOTALE
IF(MODIF.EQ.NOM(13)) READ(5,*) QHIM
IF(MODIF.EQ.NOM(14)) READ(5,*) QHIP
IF(MODIF.EQ.NOM(15)) READ(5,*) A
IF(MODIF.EQ.NOM(16)) READ(5,*) ANG
IF(MODIF.EQ.NOM(17)) READ(5,*) B
IF(MODIF.EQ.NOM(18)) READ(5,*) DISL

```

```

IF(MODIF.EQ.NOM(19)) READ(5,*) RN
IF(MODIF.EQ.NOM(20)) READ(5,*) RF
IF(MODIF.EQ.NOM(21)) READ(5,*) XC
IF(MODIF.EQ.NOM(22)) READ(5,*) YC
IF(MODIF.EQ.NOM(23)) READ(5,*) ZC
IF(MODIF.EQ.NOM(24)) READ(5,*) YT
IF(MODIF.EQ.NOM(25)) READ(5,*) OMEG1
IF(MODIF.EQ.NOM(26)) READ(5,*) OMEG2
IF(MODIF.EQ.NOM(27)) READ(5,*) BT
IF(MODIF.EQ.NOM(28)) GO TO 5
GO TO 20

```

C
C
C
C
C

TEST DE SECURITE SUR LES DONNEES

```

30 TANALP=TAN(ALPHA*PI/180.)
   TANDIR=TAN((ALPHA+2.*TETA)*PI/180.)
   IF((KPERFO.GT.0).AND.(KPERFO.LT.5)) GO TO 31
   WRITE(6,3000)
   GO TO 20
31 IF((IO.GE.0).AND.(IO.LT.16)) GO TO 32
   WRITE(6,3001)
   GO TO 20
32 IF(PZY.GT.0.) GO TO 33
   WRITE(6,3002)
   GO TO 20
33 IF((IMP.GT.0).AND.(IMP.LT.4)) GO TO 34
   WRITE(6,3003)
   GO TO 20
34 IF((IDEF.GE.0).AND.(IDEF.LT.2)) GO TO 35
   WRITE(6,3004)
   GO TO 20
35 IF((IOPT.GT.0).AND.(IOPT.LT.4)) GO TO 36
   WRITE(6,3005)
   GO TO 20
36 IF(ONDE.LT.1.E-03) GO TO 37
   WRITE(6,3006)
   GO TO 20
37 IF(TETA.GT.0.) GO TO 38
   WRITE(6,3007)
   GO TO 20
38 IF(ALPHA.LT.0.) GO TO 39
   WRITE(6,3008)
   GO TO 20
39 IF(ALPHA+2*TETA.LT.90.) GO TO 40
   WRITE(6,3009)
   GO TO 20
40 DO 41 I=1,3
   IF((ANG(I).LT.-1.).OR.(ANG(I).GT.1.)) GO TO 42
41 CONTINUE
   IF(OMEG1.LT.OMEG2) GO TO 43
   WRITE(6,3011)
   GO TO 20

```

```

42 WRITE(6,3010)
   GO TO 20
43 IF(DISL(3).EQ.0.) GO TO 44
   XE=XC-ZC*DISL(1)/DISL(3)
   XS=XE+TOTALE*DISL(1)/DISL(3)
   ZE=0.
   GO TO 45
44 XE=XC
   ZE=ZC
   XS=XC
45 XEA=XE-(TOTALE-ZE)*TANALP
   XEB=XE+(TOTALE-ZE)*TANDIR
   XEA=AMAX1(XEA,XS)
   XEB=AMIN1(XEB,XS)
   IF((OMEG2.GT.XEB).OR.(OMEG1.LT.XEA)) GO TO 47
   WRITE(6,3012)
   GO TO 20

```

```

C
C-----
C   CREATION DU NOUVEAU FICHIER DE DONNEES
C-----
C

```

```

47 WRITE(14)NOMFIC,SOV1,SOV2,SAUV1,SAUV2
   WRITE(14)TITRE,KPERFO,IO,PZY,IMP,IDEF,IOPT
   WRITE(14)ONDE,TETA,ALPHA,ABSORB,TOTALE,QHIM,QHIP
   WRITE(14)A,ANG,B,DISL,RN,RF
   WRITE(14)XC,YC,ZC,YT,OMEG1,OMEG2,BT

```

```

C
   NUMPL=0
   XOR=OMEG2+TOTALE*TANDIR
   NEW=1
   OPEN(12,FILE=SOV1,FORM='UNFORMATTED')
   GO TO 60

```

```

C
C   LECTURE DE L'ANCIEN FICHIER SOV1
C

```

```

50 WRITE(6,1029)
   READ(5,2021)SOV1
   WRITE(6,1030)
   READ(5,2021)SOV2
   OPEN(12,FILE=SOV1,FORM='UNFORMATTED')
   READ(12)NUMPL
   READ(12)MAXPL,XOR
   WRITE(6,2023)NUMPL,XOR,MAXPL
   REWIND(12)
   NEW=0

```

```

60 WRITE(6,2024)
   READ(5,*)MAXPL

```

```

C
C   CREATION DU FICHIER SOV1
C

```

```

   WRITE(12)NUMPL
   WRITE(12)MAXPL,XOR
   CLOSE(12)

```

```
OPEN(13,FILE=SOV2,FORM='UNFORMATTED')
IF(NEW.EQ.1) GO TO 70
```

```
C
C LECTURE DE L'ANCIEN FICHER SOV2
C
```

```
READ(13)NUMPL
READ(13)BIDON,XOR
WRITE(6,2025)NUMPL,XOR
REWIND(13)
```

```
C
C CREATION DU FICHER SOV2
C
```

```
70 WRITE(13)NUMPL
WRITE(13)MAXPL,XOR
CLOSE(13)
STOP
```

```
C
C -----
C FORMATS UTILISES POUR L'ENTREE DES DONNEES
C -----
C
```

```
1001 FORMAT(' DONNEZ LE TITRE DE 72 CARACTERES')
1002 FORMAT(' DONNEZ LE COEFFICIENT D APODISATION KPERFO')
1003 FORMAT(' DONNEZ LA VALEUR DE IO'/
S'      SI IO=6 SORTIE DES INTENSITES SUR LISTING'/
S'      SI IO=0 SORTIE DES INTENSITES SUR DISQUE UNIQUEMENT')
1004 FORMAT(' DONNEZ PZY (RAPPORT ENTRE PAS VERTICAL ET PAS'/
S'      HORIZONTAL DE REPRESENTATION)')
1005 FORMAT(' DONNEZ LA VALEUR DE IMP'/
S'      SI IMP=1 CHAQUE PLAN D INCIDENCE EST CALCULE'/
S'      SI IMP=2 CALCUL D UN PLAN SUR DEUX'/
S'      SI IMP=3 CALCUL D UN PLAN SUR TROIS')
1006 FORMAT(' DONNEZ LA VALEUR DE IDEF'/
S'      SI IDEF=0 UTILISATION D UN RESEAU AVEC RAFFINEMENT'/
S'      DANS LA ZONE DE L IMAGE DIRECTE'/
S'      SI IDEF=1 RESEAU A PAS VARIABLE CLASSIQUE UTILISE PARTOUT')
1007 FORMAT(' DONNEZ IOPT POUR CHOISIR LES PAS D INTEGRATION '/
S'      LORS DU CALCUL DES SECTIONS: '/
S'      IOPT ! AFIN ! Pmean ! Pinit ! Pmax !'/
S'      !-----!'/
S'      ! 1 ! 4. ! 0.8 ! 0.2 ! 1.6 !'/
S'      ! 2 ! 4. ! 0.4 ! 0.1 ! 0.8 !'/
S'      ! 3 ! 8. ! 0.8 ! 0.1 ! 1.6 !')
1008 FORMAT(' DONNEZ LA LONGUEUR D ONDE UTILISEE EN MICRON : ONDE')
1009 FORMAT(' DONNEZ L ANGLE DE BRAGG TETA EN DEGRES')
1010 FORMAT(' DONNEZ L ANGLE ALPHA ENTRE LA NORMALE A LA FACE'/
S'      D ENTREE DU CRISTAL ET LE FAISCEAU REFRACTE')
1011 FORMAT(' DONNEZ ABSORB , ABSORPTION PHOTOELECTRIQUE PAR MICRON')
1012 FORMAT(' DONNEZ L EPAISSEUR DU CRISTAL TOTALE EN MICRONS')
1013 FORMAT(' DONNEZ LA PARTIE REELLE ET LA PARTIE IMAGINAIRE'/
S'      DE LA SUCEPTIBILITE DIELECTRIQUE QHIM')
1014 FORMAT(' DONNEZ LA PARTIE REELLE ET LA PARTIE IMAGINAIRE'/
S'      DE LA SUCEPTIBILITE DIELECTRIQUE QHIP')
1015 FORMAT(' DONNEZ LES PARAMETRES A DE LA MAILLE EN MICRON')
```

```

1016 FORMAT(' DONNEZ LES COSINUS DES ANGLES DE LA MAILLE : ANG')
1017 FORMAT(' DONNEZ LES COMPOSANTES DU VECTEUR DE BURGERS B')
1018 FORMAT(' DONNEZ LES COMPOSANTES DISL DE LA LIGNE DE LA'/
S'      DISLOCATION DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1019 FORMAT(' DONNEZ LES INDICES DE LA NORMALE A LA FACE'/
S'      D ENTREE DU CRISTAL : RN')
1020 FORMAT(' DONNEZ LES INDICES DE LA REFLEXION RF')
1021 FORMAT(' DONNEZ L ABSCISSE EN MICRONS XC D UN POINT DU COEUR '/
S'      DE LA DISLOCATION DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1022 FORMAT(' DONNEZ L ORDONNEE YC DU  POINT DU COEUR DE LA'/
S'      DISLOCATION DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1023 FORMAT(' DONNEZ LA PROFONDEUR ZC DU POINT DU COEUR DE LA'/
S'      DISLOCATION DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1024 FORMAT(' DONNEZ LA HAUTEUR YT DE L IMAGE A SIMULER EN MICRONS')
1025 FORMAT(' DONNEZ OMEG1 ABSCISSE DU BORD DROIT DE L IMAGE'/
S'      EN MICRONS DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1026 FORMAT(' DONNEZ OMEG2 ABSCISSE DU BORD GAUCHE DE L IMAGE'/
S'      EN MICRONS DANS LE REPERE EXPERIMENTAL')
1027 FORMAT(' DONNEZ LES COEFFICIENTS ELASTIQUES BT(21)')
1028 FORMAT(' DONNEZ LE NOM NOMFIC DU FICHIER QUI CONTIENDRA'/
S ' L IMAGE  (8 CARACTERES)  ')
1029 FORMAT(' DONNEZ LE NOM DU FICHIER SOV1')
1030 FORMAT(' DONNEZ LE NOM DU FICHIER SOV2')
1031 FORMAT(' DONNEZ LE NOM DU FICHIER SAUV1')
1032 FORMAT(' DONNEZ LE NOM DU FICHIER SAUV2')

```

C

C-----

C FORMATS UTILISES EN SORTIE

C-----

C

```

2000 FORMAT(' INITIALISATION DES DONNEES POUR LE PROGAMME ADELE'//
S'      VOULEZ-VOUS CREER UN NOUVEAU FICHIER DE DONNEES '/
S'      A PARTIR D UN FICHIER DEJA EXISTANT ? OUI OU NON')
2001 FORMAT(A3)
2002 FORMAT(' VOULEZ-VOUS CREER UN FICHIER ENTIEREMENT NOUVEAU ?'/
S'      OUI OU NON')
2003 FORMAT(18A4)
2004 FORMAT(' ETAT ACTUEL DES DONNEES')
2005 FORMAT(' TITRE=',18A4)
2006 FORMAT(' KPERFO=',I2,' IO=',I2,' PZY=',F4.1,' IMP=',I2
S      ', IDEF=',I2,' IOPT=',I2)
2007 FORMAT(' ONDE=',E13.5,' MICRONS      ABSORB=',E13.5)
2008 FCRMAT(' TETA=',F9.3,' DEGRES      ALPHA=',F9.3,' DEGRES')
2009 FORMAT(' QHIM=',E13.5,' + I * ',E13.5/
S      ' QHIP=',E13.5,' + I * ',E13.5)
2010 FORMAT(' A= ',E12.4,5X,E12.4,5X,E12.4)
2011 FORMAT(' ANG= ',F9.3,5X,F9.3,5X,F9.3)
2012 FORMAT(' B= ',F9.3,5X,F9.3,5X,F9.3)
2013 FORMAT(' DISL= ',F9.3,5X,F9.3,5X,F9.3)
2014 FORMAT(' RN= ',F9.3,5X,F9.3,5X,F9.3)
2015 FORMAT(' RF= ',F9.3,5X,F9.3,5X,F9.3)
2016 FORMAT(' XC= ',F9.3,'      YC= ',F9.3,'      ZC=',F9.3,' MICRONS')
2017 FORMAT(' TOTALE = ',F9.3,'      YT = ',F9.3)
2018 FORMAT(' OMEG1 = ',F9.3,'      OMEG2 = ',F9.3)

```



```

2019 FORMAT(' COEFFICIENT ELASTIQUES  BT :',/,5X,6(F9.3,2X)/
S      16X,5(F9.3,2X),/,27X,4(F9.3,2X)/38X,3(F9.3,2X)/
S      49X,2(F9.3,2X),/,60X,F9.3)
2020 FORMAT(' SI VOUS VOULEZ MODIFIER UNE DONNEE TAPEZ SON NOM',
S',SINON REPONDEZ NON')
2021 FORMAT(A8)
2022 FORMAT(' ENTREZ LA NOUVELLE VALEUR DE ',A8)
2023 FORMAT('      NUMPL1= ',I3,'      XOR= ',F9.3/
S'      ANCIENNE VALEUR DE MAXPL =',I3)
2024 FORMAT(' DONNEZ LA VALEUR DE MAXPL : NOMBRE DE'/
S'      PLANS MAXIMUM CALCULES QUE VOUS AUTORISEZ')
2025 FORMAT('      NUMPL2= ',I3,'      XOR=',F9.3)
2026 FORMAT(' NOMFIC:',5(A8,2X))

```

C

C-----

C

TRAITEMENT DES ERREURS

C-----

C

```

3000 FORMAT(' CHANGEZ KPERFO , IL FAUT 0<KPERFO<5')
3001 FORMAT(' CHANGEZ IO , IL FAUT -1<IO<16')
3002 FORMAT(' CHANGEZ PZY , IL FAUT 0<PZY')
3003 FORMAT(' CHANGER IMP , IL FAUT 0<IMP<4')
3004 FORMAT(' CHANGEZ IDEF , IL FAUT -1<IDEF<2')
3005 FORMAT(' CHANGEZ IOPT , IL FAUT 0<IOPT<4')
3006 FORMAT(' CHANGEZ LA LONGEUR D ONDE , IL FAUT 0.<ONDE<1.E-03')
3007 FORMAT(' CHANGEZ TETA , IL FAUT 0<TETA')
3008 FORMAT(' CHANGEZ ALPHA , IL FAUT ALPHA<0.')
3009 FORMAT(' CHANGEZ TETA OU ALPHA , ADELE NE MARCHE',
S' QU EN TRANSMISSION')
3010 FORMAT(' CHANGEZ ANG , IL FAUT -1.<ANG(I)<1.')
3011 FORMAT(' CHANGEZ OMEG1 OU OMEG2 , IL FAUT OMEG1<OMEG2')
3012 FORMAT(' CHANGEZ OMEG1 OU OMEG2 CAR VOUS ETES EN DEHORS',
S' DE LA ZONE INTERESSANTE')
END

```



```

NNINN1=NNNTV1+20
NNXD=NNINN1+1
NNNT=NNXD+7
NNNTP1=NNNT+1
NNIN=NNNT+21
NNMEMO=NNIN+1
NNIRES=NNMEMO+1
NNSOMR=NNIRES+IDIM4
NNSOMR=NNSOMR+3
NNNBS=NNSOMR+IDIM8
NNNBS=NNNBS+7
JM=IDIM4-1

```

```

"

```

```

"

```

```

CALL VCLR(NNSOMR,1,IDIM8) "TABLEAU SOMREF MIS A ZERO
CALL MDTOSP(NNNBS) "SP11 <-- NESEC
NBSEC=SP11 "NBSEC: NOMBRE DE SECTIONS
ISEC=0 "ISEC: NUMERO DE LA SECTION
ETI550: ISEC=ISEC+1 "QUE L'ON CALCULE

```

```

"

```

```

" CHOIX DU RESEAU D'INTEGRATION ET CALCUL DE XD ET ZD

```

```

"

```

```

CALL CHOIX "CALCUL IRES,XD ET ZD
"
CALL MDTOSP(NNMEMO) "SP11 <-- MEMOR
MEMOR=SP11 "MEMOR: MEMORISE LE TYPE
"DE RESEAU UTILISE PRECEDEMENT
CALL MDTOSP(NNIREs) "SP11 <-- IRES
IRES=SP11 "IRES: RESEAU A UTILISER
"MAINTENANT
IF IRES = MEMOR GOTO ETI53 "RESEAU NE CHANGE PAS
IF IRES = 1 GOTO ETI30 "RESEAU AVEC IMAGE DIRECTE
"A CHARGER

```

```

"

```

```

" RESEAU SANS IMAGE DIRECTE

```

```

"

```

```

CALL MDTOSP(NNIN1) "SP11 <-- IN1
IN1=SP11 "IN1: NOMBRE D'ELEMENT DU
"TABLEAU NTV
NNNTV2=NNNTV-1
NNNTV2=NNNTV2+IN1
CALL VMOV(NNNTV2,1,NNNM,1,1) "NM=NTV(IN1)
CALL MDTOSP(NNNM) "SP11 <-- NM
NM=SP11
"
CALL VMOV(NNTRAN,1,NNTRV,1,NM) "CALCUL TABLEAU TRV
CALL VSMUL(NNP,1,NNCRAP,NNPP,1,NM) "CALCUL TABLEAU PP
CALL VSMUL(NNQ,1,NNCRAP,NNQQ,1,NM) "CALCUL TABLEAU QQ
"
IN=IN1+1

```

```

      SP11=IN
      CALL SPTOMD(NNIN)                "IN MIS EN MEMOIRE
      CALL VMOV(NNNTV,1,NNNTP1,1,IN1)  "CALCUL TABLEAU NT
      GOTO ETI40
"
"=====
"      RESEAU AVEC IMAGE DIRECTE
"=====
"
ETI30:  CALL MDTOSP(NNINN1)            "SP11 <-- INN1
      INN1=SP11                       "INN1: NOMBRE D'ELEMENT DU
                                      "TABLEAU NTV1
      NNNTV3=NNNTV1-1                "
      NNNTV3=NNNTV3+INN1              "
      CALL VMOV(NNNTV3,1,NNNM,1,1)    "NM=NTV1(INN1)
      CALL MDTOSP(NNNM)               "SP11 <-- NM
      NM=SP11                         "
                                      "
      CALL VMOV(NNTRV1,1,NNTRV,1,NM)  "CALCUL TABLEAU TRV
      CALL VSMUL(NNP1,1,NNCRAP,NNPP,1,NM) "CALCUL TABLEAU PP
      CALL VSMUL(NNQ1,1,NNCRAP,NNQC,1,NM) "CALCUL TABLEAU QQ
                                      "
      IN=INN1+1
      SP11=IN
      CALL SPTOMD(NNIN)                "IN MIS EN MEMOIRE
      CALL VMOV(NNNTV1,1,NNNTP1,1,INN1) "CALCUL TABLEAU NT
                                      "
"=====
"
ETI40:  SP11=IRES
      CALL SPTOMD(NNMEMO)              "MEMOR <-- IRES
                                      "
      NNNT2=NNNT-1
      NNNT2=NNNT2+IN
      CALL MDTOSP(NNNT2)              "SP11 <-- NT(IN)
      SP11=SP11-1                    "SP11 <-- NT(IN)-1
      CALL SPTOMD(NNNT2)              "NT(IN) REMIS EN MEMOIRE
                                      "
      SP11=1
      CALL SPTOMD(NNNT)               "NT(1) <-- 1
                                      "
      CALL VSMUL(NNPP,1,NNQH2,NNAR,1,NM) "CALCUL TABLEAU AR
      CALL VSMUL(NNPP,1,NNQH1,NNAI,1,NM) "CALCUL TABLEAU AI
      CALL VSMUL(NNQQ,1,NNQH4,NNBR,1,NM) "CALCUL TABLEAU BR
      CALL VSMUL(NNQQ,1,NNQH3,NNBI,1,NM) "CALCUL TABLEAU BI
                                      "
"=====
"      DETERMINATION DE IMAX,JMAX,I2,I3 ,XQ1,ZQ1,XP2,ZP2 ET R1
"=====
"
ETI53:  CALL DIJMAX                    "VOIR COMMENTAIRES DANS
                                      "LE SOUS-PROGRAMME
                                      "
"=====
"      CONDITIONS AUX LIMITES LE LONG DE SO

```

```

"
NNDOR1=NNDOR+1
CALL VCLR(NNDOR,1,IDIM4)
CALL VFILL(NNR1,NNDOR1,1,1)
CALL VSMUL(NNTRV,1,36,NNTRVM,1,NM)
CALL VEXP(NNTRVM,1,NNTRVM,1,NM)
"TABLEAUX DOR,DOI,
"DHR ET DHI MIS A ZERO
"DOR(2)=1.
"CALCUL DU TABLEAU
"TRVMOD(I)=EXP(FOU*TRV(I))
"
"
"  CALCUL D'UNE SECTION
"
"
"  CALL ESSAI
"VOIR COMMENTAIRES DANS
"LE PROGRAMME
"
"
"  ECLATEMENT DU TABLEAU STOR AU PAS LE PLUS FAIBLE
"  ET ADDITION DE LA SECTION
"
"
"  CALL ECLAT(JM,ISEC,IDIM8)
"VOIR COMMENTAIRES DANS
"LE PROGRAMME
"
"
"  ON BOUCLE POUR CALCULER LA SECTION SUIVANTE
"
"  IF ISEC < NBSEC GOTO ETI550
"
"  APODISATION DU TABLEAU SOMREF
"
"  CALL APOD
"VOIR LE PROGRAMME
END

```

NOM DES VARIABLEES	ADRESSE (DECIMALE) DANS LE FPS100
SO	1
CO	2
DA2	3
DA8	4
DA1	5
DA7	6
SH	7
CH	8
SH1	9
CH1	10
CC2(1)	11
CNAP(1)	13
COAP(1)	25
AP2	34
AP1	35
FOU	36
FACTOR	37
R1	38
REFLEX(1)	39
PP(1)	1039
QQ(1)	2039
DOR(1)	3039
DOI(1)	4039
DHR(1)	5039
DHI(1)	6039
XQ1	7039
ZQ1	7040
XP2	7041
ZP2	7042
AR(1)	7043
AI(1)	8043
BR(1)	9043
BI(1)	10043
TRV(1)	11043
I3	12043
IMAX	12044
I2	12045
JMAX	12046
NM	12047
TRVMOD(1)	12048
CRAP	13048
QHIAP(1)	13049
TRANSV(1)	13053
P(1)	14053
Q(1)	15053
NTV(1)	16053
IN1	16073

TRV1(1)	16074
P1(1)	17074
Q1(1)	18074
NTV1(1)	19074
INN1	19094

-XD	19095
-ZD	19096
XOM1	19097
XOM2	19098
XOR	19099
PMEAN	19100
FLOAT(KPERF)	19101
NT(1)	19102
IN	19123
MEMOR	19124
IRES	19125
STOR(1)	19126
IERROR	23126
KPERFO	23127
SOMREF(1)	23128
KUTIL	31128
IDEF	31129
XC	31130
ZC	31131
XD1	31132
XD2	31133
DMLX	31134
NBSEC	31135
PCI(1)	31136

"

"

"

\$TITLE	APOD
\$RADIX	10
\$ENTRY	APOD,0
\$INSERT	ESS.APA

"

" APODISATION DU TABLEAU SOMREF - A.SOYER DECEMBRE 1982

"

" FORTRAN A PEU PRES EQUIVALENT :

"

" LP=2*KPERFO

" KUTIL=KUTIL-LP+1

" JJ=0

" DO 596 L=1,KUTIL,KPERFO

" SSO=0.

" DO 593 J=1,LP

" 593 SSO=SSO+PCI(J)*SOMREF(L-1+J)

" JJ=JJ+1

" SCMREF(JJ)=SSO

" 596 CONTINUE

```

"-----
"
      A_SOMR      $EQU      0      "ADRESSE DE SOMREF(1)
      A_POI       $EQU      1      "ADRESSE DE POI(1)
      V_KPER      $EQU      2      "VALEUR DE KPERFO
      V_KUTI      $EQU      3      "VALEUR DE KUTIL
      V_JJ        $EQU      4      "INDICE JJ
      V_LP        $EQU      5      "VALEUR DE LP
      V_L         $EQU      6      "INDICE DE BOUCLE L
      V_J         $EQU      7      "INDICE DE BOUCLE J
      A_SOML      $EQU      8      "ADRESSE DE SOMREF(L)
"
"-----
"
APOD:  LDSPI A_POI;      "A_POI <-- DB
      DB=POI            "DB <-- ADRESSE DE POI(1)
                        "
      LDMA;            "MA <-- DB
      DB=KPERFO;       "DB <-- ADRESSE DE KPERFO;
      CLR V_L          "V_L <-- 0
                        "
      LDMA;            "MA <-- DB
      DB=KUTIL;        "DB <-- ADRESSE DE KUTIL
      CLR V_JJ         "V_JJ <-- 0
                        "
      LDSPI A_SOMR;     "A_SOMR <-- DB
      DB=SOMREF        "DB <-- ADRESSE DE SOMREF(1)
                        "
      LDSPI V_KPER;     "V_KPER <-- DB
      DB=MD            "DB <-- KPERFO
                        "
      LDSPI V_KUTI;     "V_KUTI <-- DB
      DB=MD            "DB <-- KUTIL
                        "
      MOV V_KPER,V_LP   "V_LP <-- KPERFO
                        "
      ADD V_KPER,V_LP   "V_LP <-- 2*KPERFO
                        "
      SUB V_LP,V_KUTI   "V_KUTI <-- KUTI-LP
                        "
      MOV A_SOMR,A_SOML "A_SOML <-- ADRESSE DE SOMREF(1)
                        "
"-----
"
LOOP96: FADD ZERO,ZERO;  "SERT A SORTIR 0. DANS 2 CYCLES
      ADD V_L,A_SOML    "A_SOML <-- ADRESSE DE SOMREF(L)
                        "
      FADD;            "POUSSE L'ADDITION
      CLR V_J          "V_J <-- 0
                        "
"-----
"
LOOP93: ADDI V_J,A_POI;  "SPFN <-- ADRESSE DE POI(J)
      SETMA;          "MA <-- SPFN

```



```

DPX(0)<FA          "DPX(0) <-- NOUVEAU SSO
"
ADD£ V_J,A_SOML;   "SPFN <-- ADRESSE DE SOMREF(L+J-1)
SETMA              "MA <-- SPFN
"
NOP               "ON SE LA COULE DOUCE
"
DPX(1)<DB;         "DPX(1) <-- DB
DB=MD;            "DB <-- POI(J)
INC V_J           "V_J <-- J+1
"
FMUL DPX(1),MD     "CALCUL DE POI(J)*SOMREF(L+J-1)
"
FMUL              "POUSSE LE MULTIPLIEUR
"
FMUL              "ET VA QUE J'TE POUSSE
"
FADD FM,DPX(0);    "CALCUL DE SSO+POI(J)*SOMREF(L+J-1)
SUB£ V_J,V_LP      "SPFN <-- LP-J
"
FADD;             "VA-TU AVANCER FAINEANT !
BGT LOOP93         "ON BOUCLE SI LP > J
"
"-----
"
ADD£ V_JJ,A_SOMR;  "SPFN <-- ADRESSE DE SOMREF(JJ)
SETMA;            "MA <-- SPFN
MI<FA            "MISE EN MEMOIRE DU NOUVEAU SOMREF(JJ)
"
INC V_JJ          "V_JJ <-- JJ+1
"
MOV A_SOMR,A_SOML  "A_SOML <-- ADRESSE DE SOMREF(1)
"
SUB£ V_L,V_KUTI    "SPFN <-- KUTIL-L
"
ADD V_KPER,V_L;    "V_L <-- L+KPERFO
BGT LOOP96         "ON BOUCLE SI KUTIL > L
"
"-----
"
LDMA;             "MA <-- DB
DB=KUTIL          "DB <-- ADRESSE DE KUTIL
"
STATMA;           "INITIALISE LE CYCLE D'ECRITURE
MOVE V_JJ,V_JJ;   "SPFN <-- JJ
DB=SPFN;          "DB <-- SPFN
MI<DB             "NOUVEAU KUTIL MIS EN MEMOIRE
"
RETURN
$END
"
"-----
"

```

```

$TITLE      BOU400
$RADIX      10
$ENTRY      BOU400,0
$EXT        DIV, !ONE
$INSERT     ESS.APA
$INSERT     ESS2.APA

```

```

*****

```

```

"          BOU400.APA          VERSION JUIN 1982          ALAIN SOYER
"          VOIR FORTRAN EQUIVALENT DANS ESSAI

```

```

*****

```

```

BCU400:  LDSPI N; DB=PP-2      "N <-- (ADRESSE DE PP(1)) - 2
"
      ADD& N,I;                "CALCUL DE L'ADRESSE DE PP(I1)
      SETMA                    "MA <-- ADRESSE DE PP(I1)
"
      LDMA; DB=SO;             "MA <-- ADRESSE DE SO
      LDSPI N1                 "N1 <-- ADRESSE DE SO
"
      INCMA;                   "MA <-- ADRESSE DE CO
      MOV      S_XQ1,N         "N <-- ADRESSE DE XQ1
"
      DPX(0)<MD;               "DPX(0) <-- PP(I1)
      INC N                    "N <-- ADRESSE DE ZQ1
"
      FMUL DPX(0),MD;          "CALCUL DE PP(I1)*SO
      INC N; SETMA             "MA <-- ADRESSE DE XP2
"
      FMUL DPX(0),MD;          "CALCUL DE PP(I1)*CO
      INCMA;                   "MA <-- ADRESSE DE ZP2
      INC N1                   "N1 <-- ADRESSE DE CO
"
      FMUL                     "
"
      FSUBR FM,MD;             "CALCUL DE XP2-PP(I1)*SO
      FMUL;                    "
      INC N1; SETMA            "MA <-- ADRESSE DE DA2
"
      FADD FM,MD;              "CALCUL DE ZP2-PP(I1)*CO
      INCMA                    "MA <-- ADRESSE DE DA8
"
      DPX(-4)<FA;               "DPX(-4) <-- NOUVEAU XP2
      FADD DPX(2),FA;          "CALCUL DE X=XQ2+NOUVEAU XP2
      INCMA                    "MA <-- ADRESSE DE DA1
"
      DPX(-3)<FA;               "DPX(-3) <-- NOUVEAU ZP2
      FADD DPX(1),FA;          "CALCUL DE Z=ZQ2+NOUVEAU ZP2
      INCMA;                   "MA <-- ADRESSE DE DA7
      DPY(-4)<MD                "DPY(-4) <-- DA2
"
      DPX(-2)<FA;               "DPX(-2) <-- X
      FMUL DPY(-4),FA;          "CALCUL DE DA(2)*X
      FADD;                    "
      DPY(-3)<MD                "DPY(-3) <-- DA8

```

```

DPX(-1)<FA;          "DPX(-1) <-- Z
FMUL DPY(-3),FA;      "CALCUL DE Z*DA(8)
DPY(-2)<MD            "DPY(-2) <-- DA1
"
FMUL DPX(-2),DPY(-2); "CALCUL DE X*DA(1)
DPY(-1)<MD            "DPY(-1) <-- DA7
"
FMUL DPX(-1),DPY(-1); "CALCUL DE Z*DA(7)
DPY(0)<FM            "DPY(0) <-- X*DA(2)
"
FMUL;
FADD FM,DPY(0);      "CALCUL DE X2
MOV N,N; SETMA;      "MA <-- ADRESSE DE XP2
MI<DPX(-4)           "NOUVEAU XP2 REMIS EN MEMOIRE
"
FMUL;
DPY(0)<FM;           "DPY(0) <-- X*DA(1)
FADD;
INCMA;               "MA <-- ADRESSE DE ZP2
MI<DPX(-3)          "NCUVEAU ZP2 REMIS EN MEMOIRE
"
FADD FM,DPY(0);      "CALCUL DE X1
DPX(-2)<FA;          "DPX(-2) <-- X2
LDSPI N1; DB=20      "N1 <-- 20
"
LDSPE N; DB<DPX(-2); "N <-- EXPOSANT DE X2
FADD
"
DPY(-1)<FA;          "DPY(-1) <-- X1
ADD N,N1;            "SPFN <-- N+20
LDTMA; DB=!ONE       "TMA <-- ADRESSE DU REEL 1.
"
BGE OK;              "OK SI N>= -20
LDSPI N3; DB=BI      "N3 <-- ADRESSE DE BI(1)
"
JMP ETI405           "ABS(X2) EST INFERIEURE A E-06
"
OK: LDMA; DB=CNAP;    "MA <-- ADRESSE DE CNAP(1)
LDSPI N              "N <-- ADRESSE DE CNAP(1)
"
LDMA; DB=COAP;       "MA <-- ADRESSE DE COAP(1)
LDSPI N1             "N1 <-- ADRESSE DE COAP(1)
"
INC N;               "N <-- ADRESSE DE CNAP(2)
SETMA                "MA <-- ADRESSE DE CNAP(2)
"
FMUL DPX(-2),MD;     "CALCUL DE X2*CNAP(1)
INC N; SETMA         "MA <-- ADRESSE DE CNAP(3)
"
FMUL;
DPY(-4)<MD;          "DPY(-4) <-- COAP(1)
INC N; SETMA         "MA <-- ADRESSE DE CNAP(4)
"

```

```

FMUL DPX(-2),DPX(-2);          "CALCUL DE X4=X2*X2
DPX(-4)<MD;                    "DPX(-4) <-- CNAP(2)
INC N1; SETMA                  "MA <-- ADRESSE DE COAP(2)
                                "
FMUL DPX(-2),MD;              "CALCUL DE X2*CNAP(3)
FADD FM,DPY(-1)                "CALCUL DE CO1=X1+X2*CNAP(1)
                                "
FMUL DPY(-1),MD;              "CALCUL DE X1*CNAP(4)
FADD                            "
                                "
FMUL FM,DPX(-4);              "CALCUL DE CNAP(2)*X4
FSUBR DPY(-4),MD;             "CALCUL DE COAP(2)-COAP(1)
DPY(-4)<FA;                    "DPY(-4) <-- CO1
INC N1; SETMA;                "MA <-- ADRESSE DE COAP(3)
DPX(-4)<FM                     "DPX(-4) <-- X4
                                "
FMUL DPY(-4),DPY(-4);          "CALCUL DE CO1*CO1
FADD;
DPY(-4)<FM                     "DPY(-4) <-- X2*CNAP(3)
                                "
FMUL DPX(-2),FA;              "CALCUL DE CO2=X2*(COAP(2)-COAP(1))
FADD FM,DPY(-4)                "CALCUL DE X2*CNAP(3)+X1*CNAP(4)
                                "
FMUL DPY(-1),MD;              "CALCUL DE X1*COAP(3)
DPX(-3)<FM;                    "DPX(-3) <-- X4*CNAP(2)
FADD;
DPY(0)<TM                      "DPY(0) <-- 1.
                                "
FMUL;
FADD FM,DPX(-3);              "CALCUL DE CO1**2+X4*CNAP(2)
DPY(-3)<FA                     "DPY(-3) <-- X2*CNAP(3)+X1*CNAP(4)
                                "
FMUL;
FADD;
DPX(-3)<FM;                    "DPX(-3) <-- CO2
DPY(-2)<DPX(1)                 "DPY(-2) <-- ZQ2
                                "
DPX(0)<FA;                     "DPX(0) <-- CO1**2+CNAP(2)*X4
DPY(-4)<FM;                    "DPY(-4) <-- COAP(3)*X1
INC N1; SETMA                  "MA <-- ADRESSE DE COAP(4)
                                "
JSR DIV                        "CALCUL DE DNOM
                                "
FADD DPX(-3),DPY(-4);          "CALCUL DE CO2+X1*COAP(3)
INC N; SETMA;                 "MA <-- ADRESSE DE CNAP(5)
DPY(-4)<MD                     "DPY(-4) <-- COAP(4)
                                "
FMUL DPX(0),DPY(-3);          "CALCUL DE DH1X2
FADD;
INC N; SETMA                  "MA <-- ADRESSE DE CNAP(6)
                                "
FMUL DPX(0),FA;               "CALCUL DE DH1X1
INC N; SETMA                  "MA <-- ADRESSE DE CNAP(7)
                                "

```

```

FMUL DPX(-2),MD;      "CALCUL DE X2*CNAP(5)
INC N; SETMA          "MA <-- ADRESSE DE CNAP(8)
                      "
FMUL DPX(-4),MD;      "CALCUL DE X4*CNAP(6)
DPY(2)<FM;             "DPY(2) <-- DH1X2
INC N1; SETMA         "ADRESSE DE COAP(5)
                      "
FMUL DPX(-2),MD;      "CALCUL DE X2*CNAP(7)
DPY(1)<FM;             "DPY(1) <-- DH1X1
INC N1; SETMA         "MA <-- ADRESSE DE COAP(6)
                      "
FMUL DPY(-1),MD;      "CALCUL DE X1*CNAP(8)
FADD FM,DPY(-1)        "CALCUL DE CO1=X1+CNAP(5)*X2
                      "
FMUL DPY(-1),MD;      "CALCUL DE X1*COAP(5)
DPX(-3)<FM;            "DPX(-3) <-- X4*CNAP(6)
FADD                   "
                      "
FMUL;
FSUBR DPY(-4),MD;      "CALCUL DE COAP(6)-COAP(4)
DPX(-1)<FM;            "DPX(-1) <-- X2*CNAP(7)
DPY(-4)<FA             "DPY(-4) <-- CO1
                      "
FMUL DPY(-4),DPY(-4);  "CALCUL DE CO1**2
FADD FM,DPX(-1)        "CALCUL DE X1*CNAP(8)+X2*CNAP(7)
                      "
FMUL DPX(-2),FA;       "CALCUL DE CO2=X2*(COAP(6)-COAP(4))
DPY(-4)<FM;            "DPY(-4) <-- X1*COAP(5)
FADD                   "
                      "
FMUL;
DPY(-3)<FA             "DPY(-3) <-- X1*CNAP(8)+X2*CNAP(7)
                      "
FMUL;
FADD FM,DPX(-3)        "CALCUL DE CO1**2+X4*CNAP(6)
                      "
FADD FM,DPY(-4);       "CALCUL DE CO2+COAP(5)*X1
LDSPI N2; DB=BR        "N2 <-- ADRESSE DE BR(1)
                      "
FADD;
DPX(0)<FA;             "DPX(0) <-- CO1**2+X4*CNAP(6)
INC N1; SETMA          "MA <-- ADRESSE DE COAP(7)
                      "
DPX(-3)<FA;            "DPX(-3) <-- CO2+COAP(5)*X1
JSR DIV                "CALCUL DE DNOM
                      "
FMUL DPY(-3),DPX(0);   "CALCUL DE DH1X2
DPY(-3)<DPX(0);        "DPY(-3) <-- DNOM
INC N; SETMA           "MA <-- ADRESSE DE CNAP(9)
                      "
FMUL DPY(-3),DPX(-3);  "CALCUL DE DH1X1
INC N; SETMA           "MA <-- ADRESSE DE CNAP(10)
                      "
FMUL;

```

INC N; SETMA;	"MA <-- ADRESSE DE CNAP(11)
DPY(-4)<MD	"DPY(-4) <-- COAP(7)
	"
FMUL DPX(-2),MD;	"CALCUL DE X2*CNAP(9)
FADD FM,DPY(2);	"CALCUL DU NOUVEAU DH1X2
INC N; SETMA	"MA <-- ADRESSE DE CNAP(12)
	"
FMUL DPX(-4),MD;	"CALCUL DE X4*CNAP(10)
FADD FM,DPY(1);	"CALCUL DU NOUVEAU DH1X1
INC N1; SETMA	"MA <-- ADRESSE DE COAP(8)
	"
FMUL DPX(-2),MD;	"CALCUL DE X2*CNAP(11)
FADD;	
DPY(2)<FA;	"DPY(2) <-- DH1X2
INC N1; SETMA	"MA <-- ADRESSE DE COAP(9)
	"
FMUL DPY(-1),MD;	"CALCUL DE X1*CNAP(12)
FADD FM,DPY(-1);	"CALCUL DE CO1=X1+X2*CNAP(9)
DPX(0)<FA;	"DPX(0) <-- DH1X1
ADD& N2,J1; SETMA	"MA <-- ADRESSE DE BR(J1)
	"
FMUL DPY(-1),MD;	"CALCUL DE X1*COAP(8)
DPX(-3)<FM;	"DPX(-3) <-- X4*CNAP(10)
FADD	
	"
FMUL;	
FSUBR DPY(-4),MD;	"CALCUL DE COAP(9)-COAP(7)
DPX(-1)<FM;	"DPX(-1) <-- X2*CNAP(11)
DPY(-4)<FA	"DPY(-4) <-- CO1
	"
FMUL DPY(-4),DPY(-4);	"CALCUL DE CO1**2
FADD FM,DPX(-1);	"CALCUL DE X1*CNAP(12)+X2*CNAP(11)
DPX(-1)<MD	"DPX(-1) <-- BR(J1)
	"
FMUL DPX(-2),FA;	"CALCUL DE CO2=X2*(COAP(9)-COAP(7))
DPY(-4)<FM;	"DPY(-4) <-- X1*COAP(8)
FADD	
	"
FMUL;	
DPY(-3)<FA	"DPY(-3) <-- X1*CNAP(12)+X2*CNAP(11)
	"
FMUL;	
FADD FM,DPX(-3)	"CALCUL DE CO1**2+X4*CNAP(10)
	"
FADD FM,DPY(-4);	"CALCUL DE CO2+X1*COAP(8)
LDSP1 N; DB=AR-2	"N <-- ADRESSE DE AR(1) - 2
	"
FADD;	
DPX(0)<FA;	"DPX(0) <-- CO1**2+X4*CNAP(10)
DPY(1)<DPX(0);	"DPY(1) <-- DH1X1
ADD& N,I; SETMA	"MA <-- ADRESSE DE AR(I1)
	"
DPX(-3)<FA;	"DPX(-3) <-- CO2+X1*COAP(8)
JSR DIV	"CALCUL DE DNOM

```

"
FMUL DPY(-3),DPX(0);          "CALCUL DE DH1X2
DPY(-3)<DPX(0);              "DPY(-3) <-- DNOM
INC N1; SETMA                 "MA <-- ADRESSE DE AP2
"
FMUL DPY(-3),DPX(-3);        "CALCUL DE DH1X1
INC N1; SETMA;               "MA <-- ADRESSE DE AP1
DPY(-3)<MD                    "DPY(-3) <-- AR(I1)
"
FMUL DPY(-3),DPX(-1)         "CALCUL DE AR(I1)*BR(J1)
"
ADD& N3,J1; SETMA;          "MA <-- ADRESSE DE BI(J1)
FMUL;
FADD FM,DPY(2);              "CALCUL DU NOUVEAU DH1X2
DPY(2)<MD                     "DPY(2) <-- AP2
"
FMUL;
FADD FM,DPY(1)               "CALCUL DU NOUVEAU DH1X1
"
FADD;
FMUL DPY(2),FA;              "CALCUL DE DH1X2*AP2
ADD& N4,I; SETMA;           "MA <-- ADRESSE DE AI(I1)
DPX(-4)<MD;                  "DPX(-4) <-- AP1
DPY(2)<FM                     "DPY(2) <-- AR(I1)*BR(J1)
"
FMUL DPX(-4),FA;             "CALCUL DE DH1X1*AP1
DPX(-4)<MD                    "DPX(-4) <-- BI(J1)
"
FMUL DPY(-3),DPX(-4)         "CALCUL DE AR(I1)*BI(J1)
"
FMUL DPX(-1),MD;             "CALCUL DE AI(I1)*BR(J1)
DPY(1)<FM                     "DPY(1) <-- DH1X2*AP2
"
FMUL DPX(-4),MD;             "CALCUL DE AI(I1)*BI(J1)
FADD FM,DPY(1)               "CALCUL DE DH1X1*AP1+DH1X2*AP2
"
FMUL;
FADD;
DPY(-4)<FM                    "DPY(-4) <-- AR(I1)*BI(J1)
"
FMUL DPX(3),FA;              "CALCUL DE CC2(2)
FADD FM,DPY(-4)              "CALCUL DE ABI
"
FMUL;
FSUBR FM,DPY(2)              "CALCUL DE ABR
"
FMUL;
FSUBR NC,NC;
DPY(2)<FA;                    "DPY(2) <-- ABI
INC S_CH1                     "S_CH1 <-- ADRESSE DE CC2(1)
"
ETI410: FSUBR FM,DPY(2);      "CALCUL DE -DI
LDSP1 N; DB=DOR-1;           "N <-- ADRESSE DE DOR(1)-1
DPX(-3)<FM                     "DPX(-3) <-- CC2(2)

```

```

"
FMUL DPX(-3),MD; "CALCUL DE CC2(2)*AI(I1)
FSUB DPY(0),FA; "CALCUL DE DR
DPY(-4)<FA; "DPY(-4) <-- ABR
INC& S_CH1; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE CC2(2)
MI<DPX(-3) "CC2(2) MIS EN MEMOIRE
"

FMUL;
FADD;
DPY(-1)<FA; "DPY(-1) <-- (-DI)
DEC S_CH1 "S_CH1 <-- ADRESSE DE CH1
"

FMUL DPY(-1),DPY(-1); "CALCUL DE DI**2
DPX(-2)<FA; "DPX(-2) <-- DR
ADD& N4,I; SETMA "MA <-- ADRESSE DE AI(I1)
"

FMUL DPX(-2),DPX(-2); "CALCUL DE DR**2
FADD FM,DPY(-3) "CALCUL DE AC1R
"

FMUL DPX(-3),DPY(-3); "CALCUL DE AR(I1)*CC2(2)
FSUBR NC,NC "CALCUL DE AC2R
"

FMUL;
FADD;
DPX(0)<FM; "DPX(0) <-- DI**2
DPY(1)<FA "DPY(1) <-- AC1R
"

FMUL;
FADD FM,DPX(0); "CALCUL DE DR**2+DI**2
DPY(-3)<FA "DPY(-3) <-- AC2R
"

FADD;
LDSP1 N1; DB=DOI-2; "N1 <-- ADRESSE DE DOI(1)-2
DPY(3)<FM "DPY(3) <-- AR(I1)*CC2(2)
"

DPX(0)<FA; "DPX(0) <-- DR**2+DI**2
JSR DIV "CALCUL DE EI=1./(DR**2+DI**2)
"

FMUL DPY(-1),DPX(0); "CALCUL DE EI=-DI*EI
DPY(-1)<DPX(0) "DPY(-1) <-- EI
"

FMUL DPY(-1),DPX(-2) "CALCUL DE ER=DR*EI
"

FMUL;
FADD DPY(3),MD "CALCUL DE AC2I
"

FMUL FM,DPY(2); "CALCUL DE EI*ABI
FSUBR NC,NC; "CALCUL DE AC1I
DPY(-1)<FM "DPY(-1) <-- EI
"

FMUL FM,DPY(2); "CALCUL DE ER*ABI
FADD;
DPY(3)<FA; "DPY(3) <-- AC2I
DPX(-2)<FM "DPX(-2) <-- ER

```



```

"
FMUL DPX(-2),DPY(-4);          "CALCUL DE ER*ABR
DPY(2)<FA;                      "DPY(2) <-- AC1I
DPX(0)<DPY(-4)                  "DPX(0) <-- ABR
"
FMUL DPY(-1),DPX(0);          "CALCUL DE EI*ABR
FADD DPY(-1),ZERO;            "SERT A SORTIR EI DE FA DANS 2 CYCLES
DPY(0)<FM                        "DPY(0) <-- EI*ABI
"
FMUL DPY(-1),DPX(-4);          "CALCUL DE EI*BI(J1)
FADD NC,NC;                    "SORT EI DE FA DANS 2 CYCLES
DPX(0)<FM;                      "DPX(0) <-- ER*ABI
DPY(-4)<DPX(-4)                 "DPY(-4) <-- EI(J1)
"
FMUL DPX(-1),FA;              "CALCUL DE EI*BR(J1)
FSUB FM,DPY(0);               "CALCUL DE ALF11=ER*ABR-EI*ABI
DPY(0)<DPX(-1)                 "DPY(0) <-- BR(J1)
"
FMUL DPY(2),FA;              "CALCUL DE EI*AC1I
FADD FM,DPX(0);               "CALCUL DE BET11=ER*ABI+EI*ABR
"
FMUL DPX(-2),DPY(-4);          "CALCUL DE ER*BI(J1)
FADD;                          "
DPX(-1)<FM;                    "DPX(-1) <-- EI*BI(J1)
DPY(-4)<FA                      "DPY(-4) <-- ALF11
"
FMUL DPX(-2),DPY(0);          "CALCUL DE ER*BR(J1)
FADD DPX(-2),ZERO;            "SERT A SORTIR ER DE FA DANS 2 CYCLES
DPX(-4)<FM;                    "DPX(-4) <-- EI*BR(J1)
DPY(0)<FA                      "DPY(0) <-- BET11
"
FMUL DPX(-2),DPY(1);          "CALCUL ER*AC1R
FADD ZERO,DPY(1);            "SERT A SORTIR AC1R DE FA DANS 2 CYCLES
DPX(0)<FM                      "DPX(0) <-- AC1I*EI
"
FMUL DPY(2),FA;              "CALCUL ER*AC1I
FADD FM,DPX(-4)               "CALCUL DE BET21=ER*BI(J1)+EI*BR(J1)
"
FMUL DPY(-1),FA;              "CALCUL DE EI*AC1R
FSUB FM,DPX(-1)               "CALCUL DE ALF21=ER*BR(J1)-EI*EI(J1)
"
FMUL;                          "
FSUB FM,DPX(0);              "CALCUL DE ALF12=ER*AC1R-EI*AC1I
DPX(-4)<FA                     "DPX(-4) <-- BET21
"
FMUL DPX(-2),DPY(-3);          "CALCUL DE ER*AC2R
FADD DPX(-2),ZERO;            "SERT A SORTIR ER DE FA 2 CYCLES PLUS TARD
DPY(1)<FM;                    "DPY(1) <-- ER*AC1I
DPX(-1)<FA                     "DPX(-1) <-- ALF21
"
FMUL DPX(-2),DPY(3);          "CALCUL DE ER*AC2I
FADD FM,ZERO;                 "ADDITION BIDON POUR CONSERVER FM
DPY(2)<FA;                    "DPY(2) <-- ALF12
DPX(0)<DPY(3)                  "DPX(0) <-- AC2I

```

```

"
FMUL DPX(-3),FA; "CALCUL DE ER*CC2(2)
FADD NC,DPY(1) "CALCUL DE BET12=ER*AC1I+EI*AC1R
"
FMUL DPY(-1),DPX(0); "CALCUL DE EI*AC2I
FADD DPY(-1),ZERO; "SERT A SORTIR EI DE FA 2 CYCLES PLUS TARD
DPY(1)<FM; "DPY(1) <-- ER*AC2R
DPX(0)<DPY(-1) "DPX(0) <-- EI
"
FMUL DPX(0),DPY(-3); "CALCUL DE EI*AC2R
FADD;
DPY(-3)<FM; "DPY(-3) <-- ER*AC2I
DPX(1)<FA; "DPX(1) <-- BET12
ADD& N,I; SETMA "MA <-- ADRESSE DE DOR(I)
"
FMUL DPX(-3),FA; "CALCUL DE EI*CC2(2)
FADD FM,FA "CALCUL DE BET13=ER*CC2(2)+EI
"
FMUL;
FSUBR NC,NC; "CALCUL DE BET22=-ER*CC2(2)+EI
DEC N; "N <-- ADRESSE DE DOR(1)-2
DPX(-3)<FM "DPX(-3) <-- EI*AC2I
"
FMUL;
FADD FM,DPY(-3); "CALCUL DE BET14=ER*AC2I+EI*AC2R
ADD& N,I; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE DOR(I1)
DPX(0)<FA; "DPX(0) <-- BET13
DPY(3)<MD "DPY(3) <-- DOR(I)
"
FADD FM,DPX(-2); "CALCUL DE ALF22=ER+EI*CC2(2)
LDSP1 N2; DB=DHR-2; "N2 <-- ADRESSE DE DHR(1)-2
DPY(-3)<FA "DPY(-3) <-- BET22
"
FSUBR NC,NC; "CALCUL DE ALF13=ER-EI*CC2(2)
LDSP1 N3; DB=DHI-2; "N3 <-- ADRESSE DE DHI(1)-2
DPX(-2)<FA "DPX(-2) <-- BET14
"
FSUB DPY(1),DPX(-3); "CALCUL DE ALF14=ER*AC2R-EI*AC2I
ADD& N1,I; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE DOI(I1)
DPX(-3)<FA "DPX(-3) <-- ALF22
"
FMUL DPX(0),MD; "CALCUL DE BET13*DOR(I1)
FADD DPY(3),MD; "CALCUL DE DOR(I)+DOR(I1)
INC N; "N <-- ADRESSE DE DOR(1)-1
DPY(1)<FA "DPY(1) <-- ALF13
"
FMUL DPY(1),MD; "CALCUL DE ALF13*DOR(I1)
FADD;
ADD& N2,I; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE DHR(I1)
DPY(-1)<FA "DPY(-1) <-- ALF14
"
FMUL DPY(1),MD; "CALCUL DE ALF13*DOI(I1)
INC N2; "N2 <-- ADRESSE DE DHR(1)-1
DPY(3)<FA "DPY(3) <-- DOR(I)+DOR(I1)

```

```

FMUL DPX(0),MD;      "CALCUL DE BET13*DOI(I1)
DPY(1)<FM;           "DPY(1) <-- BET13*DOR(I1)
ADD& N3,I; SETMA     "MA <-- ADRESSE DE DHI(I1)
                    "
FMUL DPY(-1),MD;     "CALCUL DE ALF14*DHR(I1)
DPX(0)<FM;           "DPX(0) <-- ALF13*DOR(I1)
INC N3               "N3 <-- ADRESSE DE DHI(1)-1
                    "
FMUL DPX(-2),MD;     "CALCUL DE BET14*DHR(I1)
FADD FM,DPY(1);      "CALCUL DE ALF13*DOI(I1)+BET13*DOR(I1)
ADD& N2,I; SETMA     "MA <-- ADRESSE DE DHR(I)
                    "
FMUL DPY(-1),MD;     "CALCUL DE ALF14*DHI(I1)
FSUBR FM,DPX(0);     "CALCUL DE ALF13*DOR(I1)-BET13*DOI(I1)
INC N1               "N1 <-- ADRESSE DE DOI(1)-1
                    "
FMUL DPX(-2),MD;     "CALCUL DE BET14*DHI(I1)
FSUBR NC,NC;         "MA <-- ADRESSE DE DHI(I)
ADD& N3,I; SETMA     "DPX(-2) <-- ALF14*DHR(I1)
DPX(-2)<FM;          "DPY(-1) <-- ALF13*DOI(I1)+BET13*DOR(I1)
DPY(-1)<FA           "
                    "
FMUL DPX(1),MD;      "CALCUL DE BET12*DHR(I)
FADD FM,DPY(-1)      "CALCUL DE BET13*DOR(I1)+ALF13*DOI(I1)+BET14*DHR(I1)
                    "
FMUL DPY(2),MD;      "CALCUL DE ALF12*DHR(I)
FADD DPX(-2),FA;     "CALCUL DE ALF13*DOR(I1)-BET13*DOI(I1)+ALF14*DHR(I1)
ADD& N,I; SETMA;     "MA <-- ADRESSE DE DOR(I)
DPY(-1)<FM           "DPY(-1) <-- ALF14*DHI(I1)
                    "
FMUL DPX(1),MD;      "CALCUL DE BET12*DHI(I)
FADD DPY(-1),FA;     "CALCUL DE BET13*DOR(I1)+ALF13*DOI(I1)+
                    "BET14*DHR(I1)+ALF14*DHI(I1)
DPX(0)<FM            "DPX(0) <-- BET14*DHI(I1)
                    "
FMUL DPY(2),MD;      "CALCUL DE ALF12*DHI(I)
FSUBR DPX(0),FA;     "CALCUL DE ALF13*DOR(I1)-BET13*DOI(I1)+
                    "ALF14*DHR(I1)-BET14*DHI(I1)
ADD& N1,I; SETMA;     "MA <-- ADRESSE DE DOI(I)
DPX(0)<FM            "DPX(0) <-- BET12*DHR(I)
                    "
FMUL DPY(0),MD;      "CALCUL DE BET11*DOR(I)
FADD DPX(0),FA;      "BET12*DHR(I) AJOUTE AU NOUVEAU DOI(I)
DPX(1)<FM;           "DPX(1) <-- ALF12*DHR(I)
DEC N1               "N1 <-- ADRESSE DE DOI(1)-2
                    "
FMUL DPY(-4),MD;     "CALCUL DE ALF11*DOR(I)
FADD DPX(1),FA;      "ALF12*DHR(I) AJOUTE AU NOUVEAU DOR(I)
ADD& N2,I; SETMA;     "MA <-- ADRESSE DE DHR(I)
DPX(1)<FM            "DPX(1) <-- BET12*DHI(I)
                    "
FMUL DPY(0),MD;      "CALCUL DE BET11*DOI(I)
FADD FM,FA;          "ALF12*DHI(I) AJOUTE AU NOUVEAU DOI(I)

```

```

DPY(2)<MD;          "DPY(2) <-- DOI(I)
DEC N2              "N2 <-- ADRESSE DE DHR(1)-2
                    "
FMUL DPY(-4),MD;    "CALCUL DE ALF11*DOI(I)
FSUBR DPX(1),FA;    "BET12*DHI(I) SOUITRAIT DU NOUVEAU DOR(I)
ADD& N3,I; SETMA;   "MA <-- ADRESSE DE DHI(I)
DPY(1)<FM           "DPY(1) <-- BET11*DOR(I)
                    "
FMUL DPX(-3),MD;    "CALCUL DE ALF22*DHR(I)
FADD DPY(1),FA;     "BET11*DOR(I) AJOUTE AU NOUVEAU DOI(I)
DPX(1)<FM;          "DPX(1) <-- ALF11*DOR(I)
DEC N3              "N3 <-- ADRESSE DE DHI(1)-2
                    "
FMUL DPY(-3),MD;    "CALCUL DE BET22*DHR(I)
FADD DPX(1),FA;     "ALF11*DOR(I) AJOUTE AU NOUVEAU DOR(I)
ADD& N1,I; SETMA;   "MA <-- ADRESSE DE DOI(I1)
DPY(1)<FM           "DPY(1) <-- BET11*DOI(I)
                    "
FMUL DPY(-3),MD;    "CALCUL DE BET22*DHI(I)
FADD FM,FA;         "CALCUL DU NOUVEAU DOI(I)
ADD& N2,I; SETMA    "MA <-- ADRESSE DE DHR(I1)
                    "
FMUL DPX(-3),MD;    "CALCUL DE ALF22*DHI(I)
FSUBR DPY(1),FA;    "CALCUL DU NOUVEAU DOR(I)
DPX(-3)<FM;         "DPX(-3) <-- ALF22*DHR(I)
INC N1              "N1 <-- ADRESSE DE DOI(1)-1
                    "
FMUL;              "CALCUL DE DOI(I)+DOI(I1)
FADD DPY(2),MD;     "MA <-- ADRESSE DE DOI(I)
ADD& N1,I; SETMA;   "DPX(1) <-- BET22*DHR(I)
DPX(1)<FM;          "NOUVEAU DOI(I) REMIS EN MEMOIRE
MI<FA              "
                    "
FMUL DPY(0),MD;     "CALCUL DE BET11*DHR(I1)
FSUBR FM,DPX(-3);   "CALCUL ALF22*DHR(I)-BET22*DHI(I)
ADD& N,I; SETMA;    "MA <-- ADRESSE DE DOR(I)
MI<FA              "NOUVEAU DOR(I) REMIS EN MEMOIRE
                    "
FMUL DPY(-4),MD;    "CALCUL ALF11*DHR(I1)
FADD FM,DPX(1);     "CALCUL ALF22*DHI(I)+BET22*DHR(I)
DPY(-3)<FA;         "DPY(-3) <-- DOI(I)+DOI(I1)
INC N2              "N2 <-- ADRESSE DE DHR(1)-1
                    "
FMUL DPX(-1),DPY(-3); "CALCUL ALF21*(DOI(I)+DOI(I1))
FADD ZERO,FA        "ADDITION BIDON POUR AVOIR FA DANS 2 CYCLES
                    "
FMUL DPX(-4),DPY(-3); "CALCUL BET21*(DOI(I)+DOI(I1))
FADD FM,FA;         "ALF22*DHI(I)+BET22*DHR(I)+BET11*DHR(I1)
ADD& N3,I; SETMA    "MA <-- ADRESSE DE DHI(I1)
                    "
FMUL DPX(-4),DPY(3); "CALCUL DE BET21*(DOR(I)+DOR(I1))
FADD FM,FA;         "ALF11*DHR(I1)+ALF22*DHR(I)-BET22*DHI(I)
INC N3              "N3 <-- ADRESSE DE DHI(1)-1
                    "

```

```

FMUL DPX(-1),DPY(3);          "CALCUL ALF21*(DOR(I)+DOR(I1))
FADD FM,FA;                   "AJOUTE ALF21*(DOI(I)+DOI(I1)) AU NOUVEAU DHI(I)
MOV S_FAC,S_FAC; SETMA       "MA <-- ADRESSE DE FACTOR
                               "
FMUL DPY(-4),MD;             "CALCUL DE ALF11*DHI(I1)
FSUBR FM,FA;                 "SOUSTRAIT BET21*(DOI(I)+DOI(I1)) DU NOUVEAU DHR(I)
INCMA                        "MA <-- ADRESSE DE R1
                               "
FMUL DPY(0),MD;              "CALCUL DE BET11*DHI(I1)
FADD FM,FA                   "AJOUTE BET21*(DOR(I)+DOR(I1)) AU NOUVEAU DHI(I)
                               "
FMUL;                         "
FADD FM,FA;                 "AJOUTE ALF21*(DOR(I)+DOR(I1)) AU NOUVEAU DHR(I)
DPX(-2)<MD                    "DPX(-2) <-- FACTOR
                               "
FMUL;                         "
FADD FM,FA;                 "AJOUTE ALF11*DHI(I1) AU NOUVEAU DHI(I)
DPY(-1)<MD                    "DPY(-1) <-- R1
                               "
FSUBR FM,FA;                 "SOUSTRAIT BET11*DHI(I1) DU NOUVEAU DHR(I)
LDSP1 N; DB=NM+1             "N <-- ADRESSE DE TRVMOD(1)
                               "
FADD;                         "
ADD& N3,I; SETMA;           "MA <-- ADRESSE DE DHI(I)
DPX(-4)<FA;                   "DPX(-4) <-- NOUVEAU DHI(I)
DPY(-4)<FA;                   "DPY(-4) <-- NOUVEAU DHI(I)
MI<FA                        "NOUVEAU DHI(I) REMIS EN MEMOIRE
                               "
ADD& N2,I; SETMA;           "MA <-- ADRESSE DE DHR(I)
DPX(-3)<FA;                   "DPX(-3) <-- NOUVEAU DHR(I)
DPY(-3)<FA;                   "DPY(-3) <-- NOUVEAU DHR(I)
MI<FA                        "NOUVEAU DHR(I) REMIS EN MEMOIRE
                               "
"
"TEST DE FIN DE BOUCLE 400
"
SUB& S_IMAX,S_I2             "SPFN <-- I2-IMAX (I2 INCHANGE)
                               "
BGE END400;                  "SI I2>=IMAX ALORS FIN DE BOUCLE
INC S_I2                      "I2 <-- I2+1
                               "
JMP BOU400;                   "SI I2<IMAX ON BOUCLE
DPX(1)<DPY(-2)                "DPX(1) <-- ZQ2
                               "
END400:  RETURN
"
"-----
ETI405:  LDSP1 N2; DB=BR       "N2 <-- ADRESSE DE BR(1)
                               "
LDSP1 N; DB=AR-2              "N <-- ADRESSE DE AR(1)-2
                               "
ADD& N2,J1; SETMA            "ADRESSE DE BR(J1)
                               "
ADD& N,I; SETMA               "ADRESSE DE AR(I1)

```

```

"
ADD& N3,J1; SETMA; "ADRESSE DE BI(J1)
DPY(-2)<DPX(1)      "DPY(-2) <-- ZQ2
"
DPX(-1)<MD          "DPX(-1) <-- BR(J1)
"
ADD& N4,I; SETMA;  "ADRESSE DE AI(I1)
DPY(-3)<MD          "DPY(-3) <-- AR(I1)
"
FMUL DPY(-3),DPX(-1); "CALCUL DE AR(I1)*BR(J1)
DPX(-4)<MD          "DPX(-4) <-- BI(J1)
"
FMUL DPY(-3),DPX(-4); "CALCUL DE AR(I1)*BI(J1)
INC& S_CH1; SETMA  "MA <-- ADRESSE DE CC2(1)
"
FMUL DPX(-1),MD;    "CALCUL DE AI(I1)*BR(J1)
INCMA              "MA <-- ADRESSE DE CC2(2)
"
FMUL DPX(-4),MD;    "CALCUL DE AI(I1)*BI(J1)
DPY(2)<FM           "DPY(2) <-- AR(I1)*BR(J1)
"
FMUL;
DPY(-4)<FM          "DPY(-4) <-- AR(I1)*BI(J1)
"
FMUL TM,MD;        "CALCUL BIDON POUR SORTIR CC2(2) DE FM
FADD FM,DPY(-4);   "CALCUL DE ABI
DPY(0)<TM           "DPY(0) <-- 1.
"
FMUL;
FSUBR FM,DPY(2);   "CALCUL DE ABR
ADD& N4,I; SETMA  "MA <-- ADRESSE DE AI(I1)
"
FMUL;
FSUBR NC,NC;
DPY(2)<FA;          "DPY(2) <-- ABI
INC S_CH1          "S_CH1 <-- ADRESSE DE CC2(1)
"
JMP ETI410
$END

```

```

"
"-----
"-----
"
$TITLE      CHOIX
$RADIX      10
$ENTRY      CHOIX,0
$INSERT     ESS.APA
"
CHOIX.APA          VERSION JUILLET 1982          ALAIN SOYER
CHOIX DU RESEAU D'INTEGRATION
"
FORTRAN A PEU PRES EQUIVALENT:
"
XD=XOR-XC

```

```

"      ZD=-ZC
"      IRES=0
"      IF(IDEF.NE.0) GO TO 555
"      IF(DMLX.LT.1.E-07) GO TO 555
"      IF(XCR.LT.XD1) GO TO 555
"      IF(XOR.GT.XD2) GO TO 555
"      IRES=1
" 555 RETURN
"

```

```

"-----
"      IRE      $EQU      0      "VALEUR DE IRES
"      ADR      $EQU      1      "REGISTRE D'ADRESSE
"      IDE      $EQU      2      "VALEUR DE IDEF
"      AXC      $EQU      3      "ADRESSE DE XC
"      EXP      $EQU      4      "
"      DML      $EQU      5      "EXPOSANT DE DMLX
"
CHCIX:  LDMA; DB=XOR;      "MA <-- ADRESSE DE XOR
        LDSPI ADR          "ADR <-- ADRESSE DE XOR
        "
        LDMA; DB=XC;      "MA <-- ADRESSE DE XC
        LDSPI AXC          "AXC <-- ADRESSE DE XC
        "
        INCMA;            "MA <-- ADRESSE DE ZC
        FADD ZERO,ZERO;    "SERT A SORTIR 0. DE FA DANS 2 CYCLES
        DEC ADR            "ADR <-- ADRESSE DE XOM2
        "
        INCMA;            "MA <-- ADRESSE DE XD1
        FADD;
        DEC ADR;           "ADR <-- ADRESSE DE XOM1
        DPX(-4)<MD         "DPX(-4) <-- XOR
        "
        INCMA;            "MA <-- ADRESSE DE XD2
        FSUB DPX(-4),MD;    "CALCUL DE XD=XOR-XC
        DEC ADR;           "ADR <-- ADRESSE DE ZD
        DPY(-4)<FA         "DPY(-4) <-- 0.
        "
        INCMA;            "MA <-- ADRESSE DE DMLX
        FSUB DPY(-4),MD;    "CALCUL DE ZD=0.-ZC
        CLR IRE            "IRE <-- 0
        "
        DEC& ADR; SETMA;    "MA <-- ADRESSE DE XD
        MI<FA;             "MI <-- XD
        FSUB DPX(-4),MD     "CALCUL DE XOR-XD1
        "
        INCMA;            "MA <-- ADRESSE DE ZD
        MI<FA;             "MI <-- ZD
        FSUB DPX(-4),MD     "CALCUL DE XOR-XD2
        "
        DEC& AXC; SETMA;    "MA <-- ADRESSE DE IDEF
        FADD;
        DPX(-3)<MD;         "DPX(-3) <-- DMLX
        DPY(0)<FA          "
        "

```

```

BFLT ETI555;          "SI XOR < XD1 ALLER EN 555
DPY(0)<FA             "
                        "
BFGT ETI555;          "SI XOR > XD2 ALLER EN 555
LDSPI EXP; DB=-24     "EXP <-- (-24)
                        "
LDSPI IDE; DB=MD      "IDE <-- VALEUR DE IDEF
                        "
MOV& IDE,IDE          "SPFN <-- IDEF
                        "
BNE ETI555;           "SI IDEF NON NUL ALLER EN 555
LDSPE DML; DB=DPX(-3) "DML <-- EXPOSANT DE DMLX
                        "
SUB& EXP,DML          "SPFN <-- DML-EXP
                        "
BLT ETI555            "SI DMLX < E-7 ALLER EN 555
                        "
INC IRE               "IRE <-- 1
LDMA; DB=IRES         "MA <-- ADRESSE DE IRES
                        "
STATMA; MI<DB;        "MI <-- IRES
DB= SPFN; MOV& IRE,IRE
                        "
RETURN
$END

```

```
$TITLE      DIJMAX
$RADIX      10
$ENTRY      DIJMAX,0
$EXT        !ONE
$INSERT     ESS.APA
```

FORTRAN A PEU PRES EQUIVALENT :


```

" 83 R1=1.
" I2=3
" IF(IMAX.EQ.2)I2=2
" I3=NM

```

```

"-----
" TX EST PLACE DANS DPY(0) PUIS DPY(1)
" XOR-XOM1 DANS DPX(1)
" XOM2-XOR DANS DPX(2)

```

V_K	\$EQU	1	"VALEUR DE K
A_ZD	\$EQU	V_K	"ADRESSE DE ZD
V_NM	\$EQU	2	"VALEUR DE NM
A_CH	\$EQU	V_NM	"ADRESSE DE CH
A_TRV	\$EQU	3	"ADRESSE DE TRV(1)
A_ZP2	\$EQU	A_TRV	"ADRESSE DE ZP2
V_IMAX	\$EQU	4	"VALEUR DE IMAX
V_JMAX	\$EQU	5	"VALEUR DE JMAX
V_NMK	\$EQU	6	"VALEUR DE (NM-K)
A_IMAX	\$EQU	7	"ADRESSE DE IMAX
V_K2	\$EQU	8	"VALEUR DE K2
V_I2	\$EQU	9	"VALEUR DE I2
A_R1	\$EQU	10	"ADRESSE DE R1
A_NM	\$EQU	11	"ADRESSE DE NM

```

"
DIJMAX: LDSPI A_NM; DB=NM "A_NM <-- ADRESSE DE NM
"
LDMA; DB=XOM1; "MA <-- ADRESSE DE XOM1
CLR V_K "V_K <-- 0
"
INCMA; "MA <-- ADRESSE DE XOM2
FADD ZERO,ZERO; "SERT A SORTIR ZERO DE FA DANS 2 CYCLES
INC V_K "V_K <-- 1
"
INCMA; "MA <-- ADRESSE DE XOR
FADD NC,NC; "
INC V_K "V_K <-- 2
"
DPX(1)<MD; "DPX(1) <-- XOM1
DPY(0)<FA; "DPY(0) <-- 0.
MOV V_K,V_K2 "V_K2 <-- 2
"
MOV A_NM,A_NM; "SPFN <-- ADRESSE DE NM
SETMA; "MA <-- SPFN
DPX(2)<MD "DPX(2) <-- XOM2
"
LDSPI A_TRV; DB=TRV; "A_TRV <-- ADRESSE DE TRV(1)
FSUB DPX(2),MD "CALCUL DE XOM2-XOR
"
FSUBR DPX(1),MD; "CALCUL DE XOR-XOM1
DPY(1)<FA; "DPY(1) <-- 0.
MOV V_K,V_I2 "V_I2 <-- 2
"
LDSPI V_NM; DB=MD; "V_NM <-- VALEUR DE NM
FADD;

```

```

DPX(2)<FA          "DPX(2) <-- XOM2-XOR
"
DPX(1)<FA;          "DPX(1) <-- XOR-XOM1
MOV V_NM,V_NMK      "V_NMK <-- NM
"
DEC V_NMK;          "V_NMK <-- NM-1
LDTMA; DB=!ONE      "TMA <-- ADRESSE DU REEL 1.
"
LOOP80:  FSUB DPY(0),DPX(2); "CALCUL TX-(XOM2-XOR)
DEC V_NMK          "V_NMK <-- NM-K
"
FADD;
ADD& A_TRV,V_NMK;  "ADRESSE DE TRV(1)+(NM-K)
SETMA              "MA <-- ADRESSE DE TRV(NM-K+1)
"
MOV V_K,V_IMAX     "V_IMAX <-- K
"
BFGE ETI81         "SI TX>=XOM2-XOR ALLER A ETI81
"
FADD DPY(0),MD      "CALCUL TX+TRV(NM-K+1)
"
FADD;
MOV& V_NMK,V_NMK    "SPFN <-- NM-K
"
DPY(0)<FA;          "DPY(0) <-- NOUVEAU TX
BGT LOOP80;         "SI NM > K ON BOUCLE
INC V_K             "V_K <-- K+1
"
ETI81:  DEC A_TRV    "A_TRV <-- ADRESSE DE TRV(1)-1
"
LOOP82:  FSUB DPY(1),DPX(1) "CALCUL TX-(XOR-XOM1)
"
FADD;
ADD& A_TRV,V_K2;     "K2+ADRESSE DE TRV(1)-1
SETMA              "MA <-- ADRESSE DE TRV(K2)
"
MOV V_K2,V_JMAX     "V_JMAX <-- K2
"
BFGE ETI83         "SI TX>=XOR-XOM1 ON VA EN ETI83
"
FADD DPY(1),MD      "CALCUL TX+TRV(K2)
"
FADD;
SUB& V_K2,V_NM       "SPFN <-- NM-K2
"
DPY(1)<FA;          "DPY(1) <-- NOUVEAU TX
BGT LOOP82;         "SI NM > K2 ON BOUCLE
INC V_K2            "V_K2 <-- K2+1
"
ETI83:  LDMA; DB=I3  "MA <-- ADRESSE DE I3
"
MOV& V_NM,V_NM;     "SPFN <-- NM
MI<DB; DB=SPFN;     "I3 <-- NM
STATMA

```

```

"
MOV£ V_IMAX,V_IMAX; "SPFN <-- IMAX
MI<DB; DB=SPFN; "IMAX MIS EN MEMOIRE
INCMA "MA <-- ADRESSE DE IMAX
"
SUB£ V_I2,V_IMAX "SPFN <-- IMAX-2
"
BEQ ETI84; "SI IMAX=2 ON VA EN ETI84
LDSPI A_R1; DB=R1 "A_R1 <-- ADRESSE DE R1
"
INC V_I2 "V_I2 <-- 3
"
ETI84: MOV£ V_I2,V_I2; "SPFN <-- I2
MI<DB; DB=SPFN; "I2 MIS EN MEMOIRE
INCMA "MA <-- ADRESSE DE I2
"
MOV£ V_JMAX,V_JMAX; "SPFN <-- JMAX
MI<DB; DB=SPFN; "JMAX MIS EN MEMOIRE
INCMA "MA <-- ADRESSE DE JMAX
"
MOV A_R1,A_R1; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE R1
MI<DB; DB=TM "R1 <-- 1.
"
"-----
"
" CALCUL DE ZP2=CO*PP(1)
" XP2=-SO*PP(1)
" ZQ1=ZD-CH*QQ(1)-CO*PP(1)
" XQ1=XD+SH*QQ(1)+SO*PP(1)
"
LDSPI A_ZP2; DB=ZP2 "A_ZP2 <-- ADRESSE DE ZP2
"
LDSPI A_ZD; DB=ZD "A_ZD <-- ADRESSE DE ZD
"
LDSPI A_CH; DB=CH "A_CH <-- ADRESSE DE CH
"
LDMA; DB=QQ "MA <-- ADRESSE DE QQ(1)
"
LDMA; DB=PP "MA <-- ADRESSE DE PP(1)
"
LDMA; DB=CO "MA <-- ADRESSE DE CO
"
DECMA; "MA <-- ADRESSE DE SO
DPY(1)<MD "DPY(1) <-- QQ(1)
"
MOV£ A_CH,A_CH; "SPFN <-- ADRESSE DE CH
SETMA; "MA <-- ADRESSE DE CH
DPX(1)<MD "DPX(1) <-- PP(1)
"
FMUL DPX(1),MD; "CALCUL DE PP(1)*CO
DECMA "MA <-- ADRESSE DE SH
"
FMUL DPX(1),MD; "CALCUL DE PP(1)*SO
MOV£ A_ZD,A_ZD;
SETMA "MA <-- ADRESSE DE ZD

```

```
"
FMUL DPY(1),MD;      "CALCUL DE QQ(1)*CH
FADD ZERO,ZERO;
DECMA                "MA <--ADRESSE DE XD
"
FMUL DPY(1),MD;      "CALCUL DE QQ(1)*SH
FADD;
DPY(0)<FM            "DPY(0) <-- PP(1)*CO
"
FMUL;
FSUBR FM,FA;         "CALCUL DE XP2=-SO*PP(1)
DPY(2)<FM;           "DPY(2) <-- PP(1)*SO
DPX(0)<MD             "DPX(0) <-- ZD
"
FMUL;
FADD FM,DPY(0);      "CALCUL DE PP(1)*CO+QQ(1)*CH
DPX(3)<MD            "DPX(3) <-- XD
"
FADD FM,DPY(2);      "CALCUL DE PP(1)*SO+SH*QQ(1)
DPY(2)<FA            "DPY(2) <-- XP2
"
FSUB DPX(0),FA;      "CALCUL DE ZQ1
MOV£ A_ZP2,A_ZP2;
SETMA;
MI<DPY(0)            "MA <-- ADRESSE DE ZP2
"ZP2 MIS EN MEMOIRE
"
FADD DPX(3),FA;      "CALCUL DE XQ1
DECMA;
MI<DPY(2)            "MA <-- ADRESSE DE XP2
"XP2 MIS EN MEMOIRE
"
FADD;
DECMA;
MI<FA               "MA <-- ADRESSE DE ZQ1
"ZQ1 MIS EN MEMOIRE
"
DECMA;
MI<FA               "MA <-- ADRESSE DE XQ1
"XQ1 MIS EN MEMOIRE
"
RETURN
$END
"
"-----
"-----
"
$TITLE      ECLAT
$RADIX      10
$ENTRY      ECLAT,3
$EXT        !TENTH, !ONE, DIV, SPMUL
$INSERT     ESS.APA
"
" ECLAT.APA          VERSION JUILLET 1982          ALAIN SOYER
" ECLATEMENT DU TABLEAU D'IMAGE (REFLEX) AU PAS DE
" CALCUL LE PLUS FAIBLE .RESULTAT DANS LE TABLEAU STOR
"
"
" FORTRAN A PEU PRES EQUIVALENT:
```

```

"
"      JMAX=2*IDIM          (JMAX REMPLACE PAR JM)
"      J=1
"      STOR(1)=REFLEX(1)
"      INM1=IN-1
"      DO 58 I=1,INM1
"      K1=NT(I)+1
"      K2=NT(I+1)
"      POIDS=TRV(1)/TRV(K2)
"      DO 52 II=K1,K2
"      R2=0.
"      TEST=TRV(1)+0.01
" 54 IF(TEST-TRV(K2).GE.0.)GO TO 55
"      J=J+1
"      IF(J.GT.JMAX) GOTO 1000
"      R2=R2+POIDS
"      R1=1.-R2
"      STOR(J)=REFLEX(II-1)*R1+REFLEX(II)*R2
"      TEST=TEST+TRV(1)
"      GO TO 54
" 55 J=J+1
"      IF(J.GT.JMAX) GOTO 1000
"      STOR(J)=REFLEX(II)
" 52 CONTINUE
" 58 CONTINUE

```

```

"-----
"
"      JM      $EQU      0      "JM = 2*IDIM-1
"      K        $EQU      0      "INDICE DU TABLEAU SOMREF
"      ISEC     $EQU      1      "ISEC = NUMERO DE LA SECTION
"      IDIM4    $EQU      2      "IDIM4 = IDIM*4
"      J        $EQU      3      "INDICE DU TABLEAU STOR
"      I        $EQU      4
"      A_STOR   $EQU      5      "ADRESSE DE STOR(1)
"      A_REFL   $EQU      6      "ADRESSE DE REFLEX(1)
"      A_SOMR   $EQU      6      "ADRESSE DE SOMREF(1)
"      A_NT     $EQU      7      "ADRESSE DE NT(1)
"      KLM      $EQU      7      "MINIMUM DE J ET K
"      A_TRV    $EQU      8      "ADRESSE DE TRV(1)
"      INM1     $EQU      9      "IN-1
"      K1       $EQU     10
"      K2       $EQU     11
"      II       $EQU     10

```

```

"-----
"
ECLAT:      LD TMA; DB=!TENTH      "TMA <-- ADRESSE DE 0.1
"
"      LDMA; DB=REFLEX;          "MA <-- ADRESSE DE REFLEX(1)
"      LDSPI A_REFL              "A_REFL <-- ADRESSE DE REFLEX(1)
"
"      LDSPI A_STOR;             "A_STOR <-- ADRESSE DE STOR(1)
"      DB=STOR
"

```

```

LDMA; DB=IN;          "MA <-- ADRESSE DE IN
CLR J                 "J <-- 0
                        "
MOV£ A_STOR,A_STOR;   "MA <-- ADRESSE DE STOR(1)
SETMA;                "MI <-- REFLEX(1)
MI<DB; DB=MD          "
                        "
LDMA; DB=TRV;         "MA <-- ADRESSE DE TRV(1)
LDSPI A_TRV           "A_TRV <-- ADRESSE DE TRV(1)
                        "
LDSPI INM1; DB=MD     "INM1 <-- IN
                        "
DEC INM1;             "INM1 <-- IN - 1
DPX(3)<TM;            "DPX(3) <-- 0.1
DPY(3)<TM             "DPY(3) <-- 0.1
                        "
CLR I;               "I <-- 0
DPY(-4)<MD            "DPY(-4) <-- TRV(1)
                        "
LDSPI A_NT; DB=NT     "A_NT <-- ADRESSE DE NT(1)
                        "
LOOP58: ADD£ A_NT,I; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE NT(I)
FMUL DPX(3),DPY(3)    "CALCUL DE 0.01
                        "
FMUL; INCMA;          "MA <-- ADRESSE DE NT(I+1)
DEC A_TRV             "A_TRV <-- ADRESSE DE TRV(1)-1
                        "
FMUL;
DPY(0)<DB; DB=DPY(-4) "DPY(0) <-- TRV(1)
                        "
LDSPI K1; DB=MD;      "K1 <-- NT(I)
DPX(2)<FM             "DPX(2) <-- 0.01
                        "
LDSPI K2; DE=MD;      "K2 <-- NT(I+1)
FADD ZERO,ZERO        "
                        "
ADD£ A_TRV,K2; SETMA; "MA <-- ADRESSE DE TRV(K2)
FADD                  "
                        "
INC A_TRV;            "A_TRV <-- ADRESSE DE TRV(1)
DPY(2)<FA             "DPY(2) <-- 0.
                        "
NOP                  "HOU C'EST PAS BEAU CA !!!
                        "
DPX(0)<MD;            "DPX(0) <-- TRV(K2)
DPY(-3)<MD            "DPY(-3) <-- TRV(K2)
                        "
JSR DIV              "CALCUL DE POIDS (DANS DPX(0))
                        "
LOOP52: FADD DPY(-4),DPX(2) "CALCUL DE TRV(1)+0.01
                        "
FADD;
DPY(1)<DB; DB=DPY(2)  "DPY(1) <-- 0. (R2=0.)
                        "

```

```

DPX(1)<FA          "DPX(1) <-- TEST=TRV(1)+0.01
"
ETI54:  FSUB DPX(1),DPY(-3) "CALCUL DE TEST-TRV(K2)
"
FADD;
ADD& A_REFL,II; SETMA          "MA <-- ADRESSE DE REFLEX(II)
"
LDTMA; DB=!ONE;          "TMA <-- ADRESSE DE 1.
DPX(-1)<FA          "
"
BFGE ETI55;          "SI TEST>=TRV(K2) ALLER EN ETI55
INC J          "J <-- J+1
"
SUB& J,JM          "SPFN <-- JM-J
"
BGE OK1          "OK1 SI JM>=J
"
JMP ERROR          "
OK1:  FADD DPY(1),DPX(0); "CALCUL R2+POIDS
DPY(-1)<MD;          "DPY(-1) <-- REFLEX(II)
DECMA          "MA <-- ADRESSE DE REFLEX(II-1)
"
FADD          "
"
FMUL DPY(-1),FA;          "CALCUL REFLEX(II)*R2
FSUB TM,FA;          "CALCUL DE R1=1.-R2
DPY(1)<FA          "DPY(1) <-- R2=R2+POIDS
"
FMUL;
FADD;
DPY(-1)<MD          "DPY(-1) <-- REFLEX(II-1)
"
FMUL DPY(-1),FA          "CALCUL DE REFLEX(II-1)*R1
"
DPY(-1)<FM;          "DPY(-1) <-- REFLEX(II)*R2
FMUL          "
"
FMUL          "
"
FADD FM,DPY(-1)          "CALCUL DE STOR(J)
"
FADD DPX(1),DPY(-4) "CALCUL DE TRV(1)+TEST
"
FADD; MI<FA;          "MI <-- STOR(J)
ADD& A_STOR,J; SETMA          "MA <-- ADRESSE DE STOR(J)
"
DPX(1)<FA;          "DPX(1) <-- TEST=TEST+TRV(1)
JMP ETI54          "
ETI55:  SUB& J,JM          "SPFN=JM-J
"
EGE OK2          "OK SI JM>=J
"

```

```

      JMP ERROR
      "
OK2:   MI<DB; DB=MD;      "MI <-- REFLEX(II)
      ADD£ A_STOR,J; SETMA      "MA <-- ADRESSE DE STOR(J)
      "
      INC II      "II <-- II+1
      "
      SUB£ K2,II      "SPFN=II-K2
      "
      BGE END52      "SI II>=K2 FIN DE BOUCLE
      "
      JMP LOOP52      "ON BOUCLE SI II < K2
      "
END52: INC I      "I <-- I+1
      "
      SUB£ INM1,I      "SPFN <-- I-INM1
      "
      BGE END58      "FIN DE BOUCLE SI I>=INM1
      "
      JMP LOOP58      "ON BOUCLE SI I<INM1
      "
"-----
"      ADDITION DE LA SECTION DECALEE DANS LE TABLEAU SOMREF
"
"      J=J+1
"      K=2+(ISEC-1)*KPERFO
"      IF(K.GT.4000-KPERFO) GO TO 5002 (ERREUR)
" 560 K=K-1
"      J=J-1
"      SOMREF(K)=SOMREF(K)+STOR(J)
"      KLM=MINC(K,J)
"      IF(KLM.GT.1) GO TO 560
"      XOR=XOR-PMEAN*FLOAT(KPERF)
"
END58: LDMA; DB=KPERFO;      "MA <-- ADRESSE DE KPERFO
      INC J      "J <-- J+1
      "
      DEC ISEC      "ISEC <-- ISEC-1
      "
      LDSPI A_SOMR; DB=SOMREF      "A_SOMR <-- ADRESSE DE SOMREF(1)
      "
      LDSPI K; DB=MD      "K <-- KPERFO
      "
      JSR SPMUL      "SP(0) <-- (ISEC-1)*KPERFO
      "
      INC K      "K <-- 1+(ISEC-1)*KPERFO
      "
      LDSPI I; DB=MD      "I <-- KPERFO
      "
      SUB I,IDIM4      "IDIM4 <-- 4*IDIM-KPERFO
      "
      DEC IDIM4      "IDIM4 <-- 4*IDIM-1-KPERFO
      "
      SUB£ K,IDIM4      "SPFN <-- 4*IDIM-KPERFO-K

```



```

                                "
                                "OK SI K =< 4*IDIM-KPERFO
                                "
                                "ERREUR SI K > 4*IDIM-KPERFO
                                "
ETI560:  DEC J                  "J <-- J-1
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE STOR(J)
                                "
                                "K <-- K-1
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE SOMREF(K)
                                "
                                "DPX(-4) <-- STOR(J)
                                "KLM <-- J
                                "
                                "SPFN <-- K-J
                                "
                                "CALCUL DE SOMREF(K)+STOR(J)
                                "
                                "
                                "J =< K DONC KLM=J
                                "
                                "KLM <-- K
                                "
ETI565:  STATMA; MI<FA;        "MI <-- SOMREF(K)
                                "SPFN <-- KLM
                                "
                                "ON BOUCLE SI KLM > 0
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE KPERF
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE PMEAN
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE XOR
                                "
                                "DPX(-3) <-- KPERF
                                "
                                "CALCUL DE KPERF*PMEAN
                                "
                                "
                                "
                                "
                                "CALCUL DE XOR-KPERF*PMEAN
                                "
                                "
                                "
                                "MI<NOUVEAU XOR
                                "
                                "MA <-- ADRESSE DE KUTIL
                                "
                                "
                                "MI <-- KUTIL
                                "
STATMA; MI<DB;
DB=SPFN; INC& K

```

```

RETURN
"
"-----
ERROR:  LDMA; DB=IERROR;      "MA <-- ADRESSE DE IERROR
        CLR II                "II <-- 0
        "
        INC& II; DB=SPFN;
        STATMA; MI<DB        "MI <-- 1
        "
        RETURN
        $END
"
"-----
"-----
"    ESS.APA
"
        $COMIO      APCOM1 0,APCOM2 0,APCOM3 0,APCOM4 0
        $COMMON /APCOM1/SO,CO,DA2,DA8,DA1,DA7,SH,CH,SH1,CH1,
        CC2(2),CNAP(12),COAP(9),AP2,AP1,FOU,FACTOR
        $COMMON /APCOM2/R1,REFLEX(1000),
        PP(1000),QQ(1000),DOR(1000),DOI(1000),DHR(1000),DHI(1000),
        XQ1,ZQ1,XP2,ZP2,AR(1000),AI(1000),BR(1000),BI(1000),TRV(1000)
        $COMMON /APCOM3/I3,IMAX,I2,JMAX,NM
        $COMMON /APCOM4/TRVMOD(1000),CRAP,CHIAP(4),
        TRANSV(1000),P(1000),Q(1000),NTV(20),IN1,
        TRV1(1000),P1(1000),Q1(1000),NTV1(20),INN1,
        XD,ZD,XOM1,XOM2,XOR,PMEAN,KPERF,NT(21),IN,MEMOR,IRES,
        STOR(4000),IERROR,KPERFO,SOMREF(8000),KUTIL,IDEF,
        XC,ZC,XD1,XD2,DMLX,NBSEC,POI
"
"-----
"-----
"    ESS2.APA
"
" S_PAD REGISTERS
"
J1      $EQU      0      "J1 INDEX DE BOUCLE
JMAX2   $EQU      1      "JMAX2 MAX DE J1
N        $EQU      2      "REGISTRE DE TRAVAIL
S_XQ1   $EQU      3      "ADRESSE DE XQ1
S_CH1   $EQU      4      "ADRESSE DE CH1
S_IMAX  $EQU      5      "
S_I3    $EQU      6      "
S_I2    $EQU      7      "
I        $EQU      S_I2  "
N1       $EQU      8      "REGISTRE DE TRAVAIL 1
N2       $EQU      9      "REGISTRE DE TRAVAIL 2
N3       $EQU     10      "REGISTRE DE TRAVAIL 3
N4       $EQU     11      "ADRESSE DE AI(1)-2
S_FAC   $EQU     12      "ADRESSE DE FACTOR
"
"-----
"-----
"

```

```

$TITLE      ESSAI
$BOX
SCUS-PROGRAMME ESSAI POUR ADELE VERSION 2
ALAIN SOYER      MAI 1982
$ENDBOX
$RADIX      10
$ENTRY      ESSAI,0
$EXT BOU400
$INSERT     ESS.APA
$INSERT     ESS2.APA

```

```

"
"=====
"      FORTRAN A PEU PRES EQUIVALENT :
"-----
"      BOUCLE POUR CHANGER DE CARACTERISTIQUE
"-----
"
"      DO 300 J1=1,JMAX-1
"
"      POSITION DU POINT COURANT EN J
"
"      XQ1=XQ1-QQ(J1)*SH
"      XQ2=SH1*QQ(J1)+XQ1
"      ZQ1=ZQ1+CH*QQ(J1)
"      ZQ2=ZQ1-CH1*QQ(J1)
"      IMAX=MINO(IMAX,I3)
"
"-----
"      BOUCLE LE LONG D'UNE CARACTERISTIQUE SO      (S.P.  BOU400 )
"-----
"
"      DO 400 I=I2,IMAX
"      I1=I-1
"      XP2=XP2-SO*PP(I1)
"      ZP2=ZP2+CO*PP(I1)
"      X=XQ2+XP2
"      Z=ZQ2+ZP2
"      X1=DA1*X+DA7*Z
"      X2=DA2*X+DA8*Z
"      IF(ABS(X2).LT.0.1E-04) GOTO 410
"
"-----
"      CALCUL DES DERIVEES
"-----
"
"      X4=X2*X2
"      CO1=X1+CNAP(1)*X2
"      CO2=X2*(COAP(2)-COAP(1))
"      DNOM=1./(CO1**2+CNAP(2)*X4)
"      DH1X2=(CNAP(4)*X1+CNAP(3)*X2)*DNOM
"      DH1X1=(COAP(3)*X1+CO2)*DNOM
"
"      CO1=X1+CNAP(5)*X2
"      CO2=X2*(COAP(6)-COAP(4))

```

```

"      DNOM=1./(CO1**2+CNAP(6)*X4)
"      DH1X2=DH1X2+(CNAP(8)*X1+CNAP(7)*X2)*DNOM
"      DH1X1=DH1X1+(COAP(5)*X1+CO2)*DNOM
"
"      CO1=X1+CNAP(9)*X2
"      CO2=X2*(COAP(9)-COAP(7))
"      DNOM=1./(CO1**2+CNAP(10)*X4)
"      DH1X2=DH1X2+(CNAP(12)*X1+CNAP(11)*X2)*DNOM
"      DH1X1=DH1X1+(COAP(8)*X1+CO2)*DNOM
"
"      CC2(2)=(DH1X1*AP1+DH1X2*AP2)*QQ(J1)
" 410 ABR=AR(I1)*ER(J1)-AI(I1)*BI(J1)
"      ABI=AR(I1)*BI(J1)+AI(I1)*BR(J1)
"      DR=1.-ABR
"      DI=CC2(2)-ABI
"
"-----
"      EQUATIONS DE TAKAGI
"-----
"
"      AC1R=AR(I1)+AI(I1)*CC2(2)
"      AC2R=AR(I1)-AI(I1)*CC2(2)
"
"      EI=1./(DR**2+DI**2)
"      ER=DR*EI
"      EI=-DI*EI
"
"      AC1I=-AR(I1)*CC2(2)+AI(I1)
"      AC2I=AR(I1)*CC2(2)+AI(I1)
"
"      CALCUL DES TERMES DE LA MATRICE
"
"      ALF11=ER*ABR-EI*ABI
"      BET11=ER*ABI+EI*ABR
"      BET21=ER*BI(J1)+EI*BR(J1)
"      ALF21=ER*BR(J1)-EI*BI(J1)
"
"      ALF12=ER*AC1R-EI*AC1I
"      BET12=ER*AC1I+EI*AC1R
"      BET13=ER*CC2(2)+EI
"      BET22=-ER*CC2(2)+EI
"
"      BET14=ER*AC2I+EI*AC2R
"      ALF22=ER+EI*CC2(2)
"      ALF13=ER-EI*CC2(2)
"      ALF14=ER*AC2R-EI*AC2I
"
"      SR=DOR(I)
"      SI=DOI(I)
"      SSHR=DHR(I)
"
"      DOR(I)=ALF11*DOR(I)-BET11*DOI(I)+ALF12*DHR(I)-BET12*DHI(I)
" S    +ALF13*DOR(I1)-BET13*DOI(I1)+ALF14*DHR(I1)-BET14*DHI(I1)
"      DOI(I)=BET11*SR+ALF11*DOI(I)+BET12*DHR(I)+ALF12*DHI(I)

```

```

"      S      +BET13*DOR(I1)+ALF13*DOI(I1)+BET14*DHR(I1)+ALF14*DHI(I1)
"
"      DHR(I)=ALF21*(SR+DOR(I1))+ALF22*DHR(I)-BET22*DHI(I)
"      S      -BET21*(SI+DOI(I1))+ALF11*DHR(I1)-BET11*DHI(I1)
"      DHI(I)=BET21*(SR+DOR(I1))+BET22*SSHR+ALF22*DHI(I)
"      S      +ALF21*(SI+DOI(I1))+BET11*DHR(I1)+ALF11*DHI(I1)
" 400 CONTINUE
"
"-----
"      PRISE EN COMPTE DE L'ABSORPTION. CALCUL DE L'INTENSITE
"-----
"
"      REFLEX(J1)=R1*FACTOR*(DHR(IMAX)**2+DHI(IMAX)**2)
"      R1=R1*TRVMOD(J1)
"      I3=I3-1
"      I2=2
"      XP2=0.
"      ZP2=0.
" 300 CONTINUE
"      RETURN
"
"=====
ESSAI:      LDSPI S_FAC; DB=FACTOR      "S_FAC <-- ADRESSE DE FACTOR
"
"      LDMA; DE=JMAX      "MA <-- ADRESSE DE JMAX
"
"      LDSPI S_CH1; DE=CH1 "S_CH1 <-- ADRESSE DE CH1
"
"      LDSPI S_XQ1; DB=XQ1 "ADRESSE DE XQ1 DANS S_XQ1
"
"      LDSPI JMAX2; DB=MD  "JMAX DANS SP
"
"      DEC JMAX2;
"      DECMA      "MA <-- ADRESSE DE I2
"
"      DEC JMAX2;
"      DECMA      "JMAX2 <-- JMAX-2
"      "MA <-- ADRESSE DE IMAX
"
"      DECMA;
"      CLR J1      "MA <-- ADRESSE DE I3
"      "J1 <-- 0
"
"      LDSPI S_I2; DB=MD  "S_I2 <-- VALEUR DE I2
"
"      LDSPI S_IMAX; DB=MD "S_IMAX <-- VALEUR DE IMAX
"
"      LDSPI S_I3; DB=MD  "S_I3 <-- VALEUR DE I3
"
LOOP1:
"      LDSPI N; DB=QQ      "SPD N <-- ADRESSE DE BASE QQ(1)
"
"      ADD# N,J1;
"      SETMA      "SPFN <-- ADRESSE DE QQ(J1)
"      "ADRESSE DE QQ(J1) DANS MA
"
"      LDMA; DB=SH      "ADRESSE DE SH DANS MA

```

```

INCMA          "ADRESSE DE CH DANS MA
               "
DPX(3)<MD;      "DPX(3) <-- QQ(J1)
INCMA          "ADRESSE DE SH1 DANS MA
               "
FMUL DPX(3),MD; "CALCUL DE QQ(J1)*SH
MOV S_XQ1,S_XQ1; "SPFN <-- ADRESSE DE XQ1
SETMA          "ADRESSE DE XQ1 DANS MA
               "
FMUL DPX(3),MD; "CALCUL DE QQ(J1)*CH
INCMA          "ADRESSE DE ZQ1 DANS MA
               "
FMUL DPX(3),MD; "CALCUL DE QQ(J1)*SH1
MOV S_CH1,S_CH1; "SPFN <-- ADRESSE DE CH1
SETMA          "MA <-- ADRESSE DE CH1
               "
FSUBR FM,MD;    "CALCUL DE XQ1-QQ(J1)*SH
FMUL           "
               "
FADD FM,MD;     "CALCUL DE ZQ1+QQ(J1)*CH
FMUL           "
               "
FMUL DPX(3),MD; "CALCUL DE QQ(J1)*CH1
FADD FM,FA;     "CALCUL DE XQ2=QQ(J1)*SH1+XQ1 (NOUVEAU)
MOV S_XQ1,S_XQ1; "SPFN <-- ADRESSE DE XQ1
SETMA;          "MA <-- ADRESSE DE XQ1
MI<FA          "NOUVEAU XQ1 REMIS EN MEMOIRE
               "
INCMA; MI<FA;   "NOUVEAU ZQ1 REMIS EN MEMOIRE
FMUL;           "
FADD;           "
DPX(1)<FA       "DPX(1) <-- ZQ1+QQ(J1)*CH
               "
DPX(2)<FA;      "DPX(2) <-- XQ2
FMUL           "
               "
FSUBR FM,DPX(1); "CALCUL DE ZQ2=ZQ1-CH1*QQ(J1)
LDSP1 N4; DB=AI-2 "N4 <-- ADRESSE DE AI(1)-2
               "
FADD;           "
SUB£ S_IMAX,S_I3 "SPFN <-- I3-IMAX (I3 INCHANGE)
               "
DPX(1)<FA;      "DPX(1) <-- ZQ2
BGT          ETI1 "SI I3>IMAX ALORS IMAX INCHANGE
               "
MOV S_I3,S_IMAX "SI I3<=IMAX ALORS IMAX=I3
               "
ETI1: JSR      BOU400 "EXECUTION DE LA BOUCLE 400
               "
FMUL DPX(-4),DPY(-4); "CALCUL DE DHI(IMAX)**2
ADD£ N,J1; SETMA;     "ADRESSE DE TRVMOD(J1)
FADD ZERO,ZERO
               "

```

[illegible]

```

"
"-----
"-----
"
      $TITLE      MDTOSP
      $RADIX      10
      $ENTRY      MDTOSP,1

```

[illegible]

